

- [4] Джонстон Д.К. и др. // Высокотемпературные сверхпроводники. М.: Мир, 1988. С. 163-181.
- [5] Оно А., Яхизава У. // Jpn. J. Appl. Phys. 1987. V. 26. Part 2. N 6. P. L2043-L2045.
- [6] Jorgensen J.D., Beno M.A., Hinks D.G. e.a. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 7. P. 3608-3616.

Поступило в Редакцию  
17 марта 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 14  
05.3; 11

26 июля 1990 г.

© 1990

О ФОРМЕ И ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ  
КРИТИЧЕСКОГО ДВУМЕРНОГО ЗАРОДЫША  
НА ПОВЕРХНОСТИ [001] КРИСТАЛЛА  $A_3B_5$   
ПРИ ЭПИТАКСИАЛЬНОМ РОСТЕ

И.Л. А л е й н е р, Р.А. С у р и с

Обычно считают, что критический зародыш (КЗ), возникающий на поверхности при эпитаксиальном росте кристалла, имеет форму диска и на основании этого оценивают энергию его активации [1]. Однако для В-стабилизированной поверхности [001] кристаллов с решеткой цинковой обманки это не так. Ниже мы покажем, что КЗ, состоящий из двух последовательных слоев А и В, сильно вытянут по оси (110), а энергия его активации существенно меньше, чем у круглого зародыша.

Типичная форма КЗ приведена на рис. 1. Искривленная граница зародыша образуется за счет изломов на атомарно гладкой ступени [2]. Поскольку граница замкнута, изломы должны образовываться как на ступени (110), так и на ступени ( $1\bar{1}0$ ) (рис. 1). На вставке рис. 1 видна неравноценность этих изломов. Это связано с ярко выраженной направленностью химических связей, характерной для кристаллов  $A_3B_5$ . Именно эта неравноценность приводит к КЗ, существенно вытянутому в направлении (110). На ступени (110) образование излома сопряжено, во-первых, с разрывом двух дополнительных химических связей АВ, во-вторых, - с переходом одного атома В в газовую фазу (рис. 2, а). Образование излома на ступеньке ( $1\bar{1}0$ ) (рис. 3, а) не требует ни изменения числа атомов, ни разрыва химических связей. Лишь взаимодействие оборванных связей атомов 1 и 2 (рис. 3, а), а также разница в заполнении электронных оболочек атомов 3 и 4 (рис. 3, а) обуславливают отличие в энергии, которое, очевидно, много меньше, чем энергия химической связи.

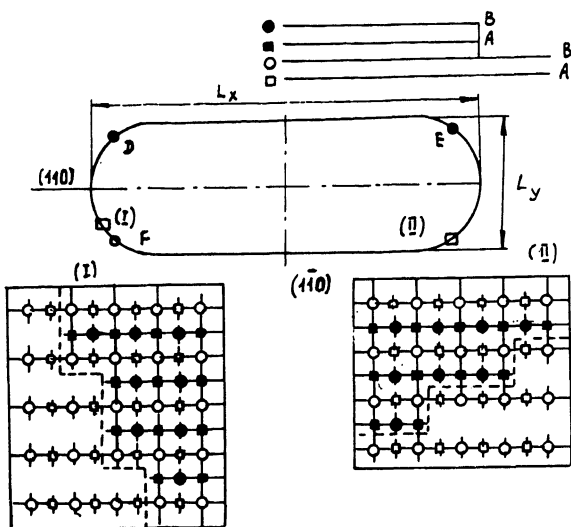


Рис. 1. Характерная форма зародыша. Во вставках приведена микроскопическая структура границы зародыша.

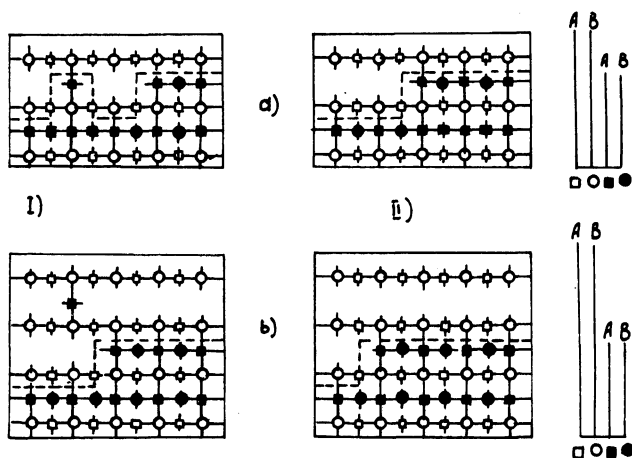


Рис. 2. Конфигурации, используемые при выводе статистики изломов на ступени  $(1\bar{1}0)$ . Правые конфигурации менее энергетически выгодны, чем левые.

В дальнейшем мы исследуем статистику изломов на ступеньках обоих видов, найдем форму КЗ и его энергию. Всюду единицей длины служит расстояние между ближайшими соседями в одном монослое. Введем систему координат с осью  $Z$  вдоль рассматриваемой

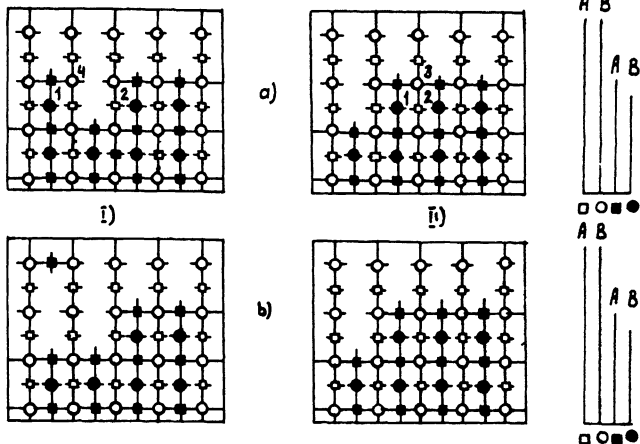


Рис. 3. Конфигурации, используемые при выводе статистики изломов на ступени  $(1\bar{1}0)$ . Правые конфигурации менее энергетически выгодны, чем левые.

ступеньки. Обозначим вероятность существования положительного или отрицательного излома высоты  $r$  в точке с координатой  $Z$  как  $n_{+r}(Z)$  и  $n_{-r}(Z)$  соответственно, а вероятность отсутствия излома в данной точке как  $q(Z)$ . Ввиду отсутствия геометрических ограничений в каждой точке<sup>1</sup> ступеньки любая из возможностей осуществляется независимо от положений в соседних точках. Поэтому вероятность некоторой конфигурации будет равна произведению вероятностей изломов, ее образующих, а условие нормировки запишется в виде [2]:

$$q(Z) + \sum_{r=1}^{\infty} \{n_{+r}(Z) + n_{-r}(Z)\} = 1. \quad (1)$$

Рассуждая аналогично [2], для функций

$$g_{\pm r}(Z) \equiv \frac{n_{\pm r}(Z)}{q(Z)} \quad (2)$$

имеем для изломов на ступеньке (110)

$$g_{+1}(Z)g_{-1}(Z) = \exp\left(-\frac{\varphi^{\delta} + \mu}{k_B T}\right), \quad (3a)$$

<sup>1</sup> Всюду в дальнейшем мы рассматриваем взаимодействие только ближайших соседей и не учитываем конфигураций, называемых „нависаниями“ (см. [2]).

где  $\varphi^{\delta}$  - удвоенная энергия химической связи,  $\mu$  - химпотенциал атома В в газовой фазе,  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура, причем  $\varphi^{\delta} + \mu \gg k_B T$ . На ступеньке (110) аналогичное соотношение

$$g_{+1}(z)g_{-1}(z) = \exp\left(-\frac{\varphi^R}{k_B T}\right), \quad (35)$$

где  $\varphi^R$  - энергия, обусловленная взаимодействием оборванных связей атомов 1 и 2 и разницей в заполнении электронных оболочек атомов 3 и 4 (рис. 3, а), причем  $\varphi^R \ll \varphi^{\delta} + \mu$ . Для обоих направлений ступенек

$$g_{\pm r}(z) = \{g_{\pm 1}(z)\}^r, \quad (4)$$

$$\{g_{\pm 1}(z)\}^2 = g_{\pm 1}(z+1)g_{\pm 1}(z-1). \quad (5)$$

Формулы (3) представляют собой закон действующих масс для образования изломов, а уравнения (4), (5) следуют из пренебрежения взаимодействием с дальними соседями.

Решение функционального уравнения (5) и сравнение вероятностей образования конфигураций I и II на рис. 2, б и 3, б позволяет найти зависимость

$$g_{\pm 1}(z) = g_{\pm 1}(0) \left(\frac{N}{N_0}\right)^{\pm z}, \quad (6)$$

где  $N$  - поверхностная концентрация атомов А в адсорбированном слое,

$$N_0 = \exp - \frac{\varphi^{\delta} + \mu + \varphi^R}{k_B T} - \quad (7)$$

их равновесная концентрация, а отношение  $\frac{N}{N_0} \equiv \alpha$  - пересыщение адсорбированного слоя. Вводя тангенс угла наклона усредненной огибающей границы [2]

$$\operatorname{tg} \theta = \sum_{r=1}^{\infty} r (n_{+r}(z) - n_{-r}(z)),$$

в условиях малой ее кривизны простым интегрированием получим уравнение для огибающей границы КЗ:  
дуга DE (рис. 1)

$$y = \frac{1}{\ln \alpha} \left[ \ln \left\{ \frac{2 \operatorname{ch} \eta_B \operatorname{ch} \eta_R}{\operatorname{sh}^2 \eta_B} \right\} + \ln \left\{ \operatorname{ch} \eta_B - \operatorname{ch} \{x \ln \alpha\} \right\} \right], \quad (9)$$

причем  $|x| \ln \alpha \leq \ln \operatorname{ch} \eta_B$ ,

где  $\zeta_b = \frac{\varphi^b + \mu}{2k_b T}$ ,  $\zeta_R = \frac{\varphi^R}{2k_b T}$ ,  $X \parallel (110)$ ,  $Y \parallel (1\bar{1}0)$ ;  
 дуга  $DF$  (рис. 1) получается простой заменой:

$$-X \rightarrow Y, Y \rightarrow X, \zeta_b \rightarrow \zeta_R, \zeta_R \rightarrow \zeta_b.$$

Остальные две дуги получаются с использованием симметрии  $C_2$ .

Результаты для общего случая громоздки, и потому приводятся в предельном случае  $\varphi^R \gg k_b T$ . Выражения для степени вытянутости зародыша  $\beta = \frac{L_y}{L_x}$  ( $L_x, L_y$  - размеры зародыша (рис. 1)), его площади  $S$  и энергии  $\mathcal{F}$ , определяемой как сумма полной энергии образования изломов на границе и энергетического выигрыша при переходе атомов из адсорбированного слоя на КЗ, приведены в таблице. Здесь же для сравнения приведены результаты для зародыша, имеющего форму диска [1].

случай	$L_y$	$\beta$	$S$	$\mathcal{F}$
$\varphi^R \gg k_b T$	$\frac{\varphi^R}{k_b T \ln \alpha}$	$\frac{\varphi^R}{\varphi^b + \mu}$	$\frac{1}{\ln^2 \alpha} \frac{\varphi^R (\varphi^b + \mu)}{k_b^2 T^2}$	$\frac{\varphi^R (\varphi^b + \mu)}{k_b T \ln \alpha}$
круглый зародыш	-	1	$\frac{\pi}{8} \frac{(\varphi^b)^2}{k_b^2 T^2 \ln^2 \alpha}$	$\frac{\pi}{8} \frac{(\varphi^b)^2}{k_b T \ln \alpha}$

Видно, что при больших пересыщениях  $\alpha_{крит}$ , таких, что  $\ln \alpha_{крит} \cong \frac{\varphi^R}{k_b T}$ , КЗ оказывается состоящим из одного ряда атомов ( $L_y \cong 1$ ). Можно показать, что на самом деле в этих условиях роль КЗ играет уже один атом независимо от соотношения между  $\varphi^R$  и  $T$ .

Итак, мы показали, что анизотропия химической связи приводит, во-первых, к вытянутости КЗ, во-вторых, к уменьшению его энергии, и, в-третьих, к тому, что пересыщение, при котором роль зародыша начинает играть один атом, определяется наименьшей из энергией образования излома.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Nishinaga T., Cho K. // Jap. Appl. Phys. 1988. 27. L12-L14.  
 [2] Burton W., Cabrera W., Frank F. Phil. Trans. 1951. A243, 299-358. Русский перевод в кн.: Элементарные процессы роста кристаллов. М.: ИИЛ, 1959. 300 с.

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе АН СССР  
 Ленинград

Поступило в Редакцию  
 20 февраля 1990 г.