

Я.П. Салій, Р.Я. Салій¹

Ефекти просторових кореляцій у процесах контрольованих захопленням на пастки

*Прикарпатський університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна,,
¹Київський Національний Університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64, Київ, 0017, Україна,*

В даній роботі досліджені ефекти, зумовлені просторовими кореляціями центрів зародження і їх впливом на кінетику накопичення і агрегації адатомів.

Ключові слова: дифузія, просторова кореляція, захоплення, комп'ютерне моделювання, кліткові автомати.

Стаття постуила до редакції 12.09.2003; прийнята до друку 23.10.2003.

I. Вступ

Дослідження статистичних ефектів, зумовлених багаточастинковими кореляціями в системі взаємодіючих частинок, носять принциповий інтерес у фізиці наномірних двовимірних кристалів, що пов'язано, у першу чергу, з постійним ростом числа робіт, присвячених вивченню механізмів і кінетики процесів, що відбуваються при змінних потоках адатомів. Ці ефекти, що мають флуктуаційну природу, можна розділити на кількісні (наприклад, зміна ефективності адсорбції атомів на зародках кластерів в залежності від величини і характеру просторових кореляцій) і якісних. До таких ефектів відноситься, наприклад, ефект адсорбційно-десорбційної агрегації, що досліджувався як методами статистичного моделювання [1], так і аналітично у випадку малих концентрацій реагентів [2].

II. Просторові кореляції при низькотемпературному накопиченню адатомів

Розглянемо найпростіший випадок накопичення малорухомих реагентів при їх некорельованій генерації, контрольованого захопленням на центри зародження кластерів (реакція $A + B \rightarrow A$, а ймовірність заповнення поверхні центрами захоплення ρ_A стала). Моделювання виконано методом ґраткових автоматів [3]. Задавались λ – локальна швидкість осадження адатомів на поверхні,

σ – швидкість елементарного акту реакції, v_p – об'єм області захоплення.

Відмітимо, що для хаотичного некорельованого розподілу центрів зародження кластерів при високій густині ρ_A заповнення ними поверхні, коли зони впливу можуть перекриватись, одержали для середньої швидкості захоплення адатомів залежність

$$k = \lambda(1 - \exp(-\rho_A v_p)), \quad (1)$$

що співпадає з раніше одержаною в [4], а у випадку корельованого розподілу центрів захоплення, з зонами впливу що не перекриваються, залежністю

$$k = \lambda c_A v_p, \quad (2)$$

де c_A – концентрація центрів.

З формул слідує, що просторовий розподіл центрів зародження суттєво впливає на середню швидкість захоплення і кінетику накопичення незахоплених адатомів. Причому цей вплив росте за експоненційним законом з виходом на насичення із ростом статистичної густини заповнення поверхні центрами захоплення. Якщо ж поверхня заповнена без перекриття зон впливу пастками із заданою концентрацією то швидкість захоплення росте пропорційно до концентрації центрів.

III. Роль просторових кореляцій у випадку рухомих адатомів

Розглянемо інший найпростіший випадок, коли накопичення адатомів обмежено дифузійно-контрольованим захопленням на центрах.

Нехай є система з рівномірним розподілом центрів малої концентрації ($c_A v_p \ll 1$). Нехай у

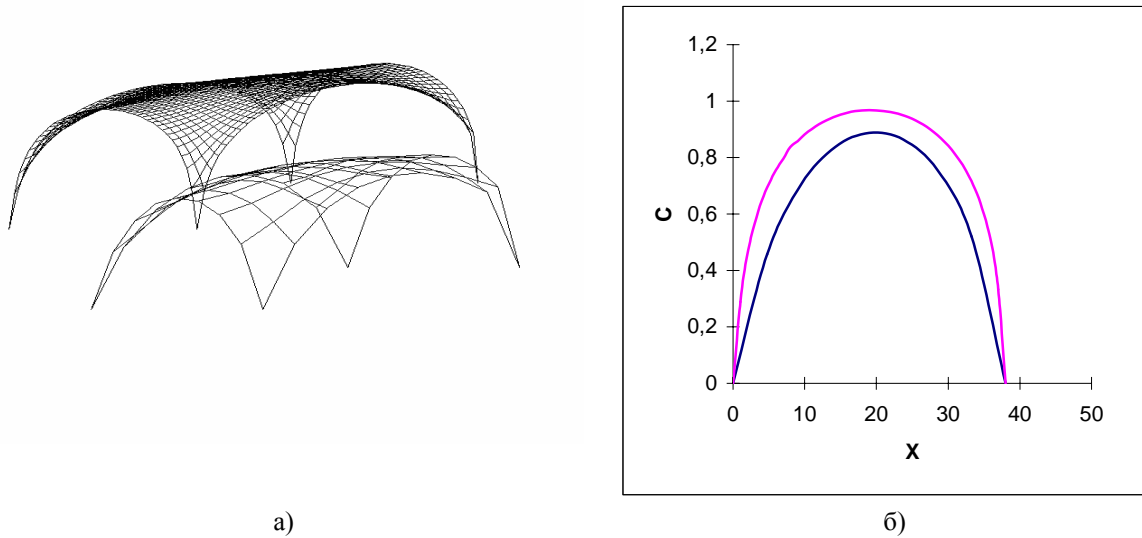


Рис. 1. Стаціонарні розподіли адатомів на площинах із однаковою квадратною сіткою пасток (а) і вздовж ребер (б) для двох коефіцієнтів дифузії адатомів, що відрізняються у 16 раз. Верхні поверхня і крива відповідають меншому коефіцієнту дифузії.

квадратній області із стороною L міститься в середньому один центр. При моделюванні використано періодичні граничні умови. Вплив неоднорідності модельовано зміною розміру L .

В роботі [2] вказувалось на існування критичних розмірів острівців адатомів, що спричинено рівновагою між дифузією, адсорбцією і десорбцією, однак суттєвою, на нашу думку, є також неоднорідність розмірів кластерів центрів захоплення.

Встановлено, що величина коефіцієнта дифузії D суттєво впливає на форму розподілу по поверхні адатомів. Робота програми перевірена у одновимірному випадку. Одержано стаціонарний розподіл локальної концентрації адатомів, що описується відомою залежністю

$$C(x) = C_{\max} \sin(\pi x/L). \quad (3)$$

Розподіл адатомів на поверхні, у випадку розташування у вершинах квадрата центрів

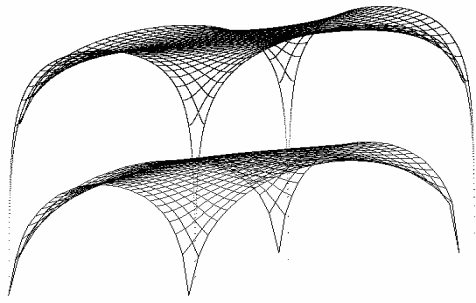


Рис. 2. Стаціонарні розподіли адатомів на площинах, одержані для однакових умов комп'ютерним моделюванням методом ґраткових автоматів і за наближеною аналітичною залежністю, відповідно нижня і верхня поверхні.

захоплення, представлено на рис. 1(а), а на рис. 1(б) розподіл вздовж одного з ребер цього квадрата. З рис. 1 видно, що зі збільшенням коефіцієнта дифузії розподіл адатомів стає неодноріднішим. Аналогічна поведінка спостерігається при збільшенні концентрації пасток для сталого розміру області захоплення.

При моделюванні коефіцієнт дифузії D змінюється за відомим співвідношенням

$$D = a^2/2d\tau, \quad (4)$$

де a і τ – відповідно просторовий і часовий кроки моделювання, а d – розмірність простору.

Зазначимо, що швидкість елементарного акту реакції σ відповідала одному крокові по часу, а розмір області захоплення r_p – розміру комірки.

Для порівняння на рис. 2 представлено концентраційну поверхню для наближеного аналітичного розв'язку, одержаного з точністю для однієї пастки на необмеженій площині

$$C(r) = \ln(r/r_p) / \ln(L_{\max}/r_p). \quad (5)$$

Це розв'язок рівняння Лапласа, для граничних умов $C(r_p) = 0$ і $C(L_{\max}) = 1$. Наближений аналітичний розв'язок для періодичної квадратної сітки одержали як суму чотирьох розподілів для стоків розташованих у вершинах квадрата. Незначне відхилення аналітичного розв'язку від одержаного комп'ютерним моделюванням спостерігається поблизу ребер квадрату. Зазначимо, що форма розподілу залежить від двох параметрів r_p і L_{\max} .

Взаємний вплив величини коефіцієнта дифузії мігруючих частинок і локальних концентрацій стоків проявиться при наявності частинок з різними коефіцієнтами дифузії, наприклад, частинок і їх малих кластерів.

Дійсно нехай D_1 і D_2 – коефіцієнт дифузії атомів і їх двохатомних кластерів ($D_1 \gg D_2$). Легко помітити, що існує температурна область у якій швидкість перебування в області пастки $4\pi D_1 r_p \gg \sigma$ (і,

відповідно, концентрації одиничних атомів поза і в середині деякої області Ω з кластерами із пасток будуть однакові), а $4\pi D_2 r_p \ll \sigma$. У цьому випадку Ω пересичена малими кластерами атомів і локальні ефективності агрегації атомів всередині і за межами Ω , сильно відрізняються, причому тим більше, чим більша швидкість осадження адатомів.

IV. Висновки

1. Просторова кореляція центрів захоплення у випадку нерухомих атомів (тобто при низьких температурах) веде до якісних змін швидкості їх захоплення, причому, відповідний вклад росте з

ростом концентрації центрів.

2. У випадку рухомих атомів (тобто при високих температурах) флуктуації у просторовому розподілі центрів захоплення можуть при певних співвідношеннях кінетичних параметрів призвести до нового якісного ефекту – локальної просторової неоднорідності розподілу адатомів і їх малих кластерів.

Салій Я.П. – кандидат фізико-математичних наук, доцент;

Салій Р.Я. – студент фізичного факультету.

- [1] М.Е. Компан. Механизм первичной самоорганизации пористого кремния // *ФТТ*, **45**(5), сс. 902-906 (2003).
- [2] С.А. Кукушкин, О.В. Осипов. Морфологическая устойчивость островков, растущих из пара на твердой поверхности // *ФТТ*, **37**(1), сс. 119-123 (1995).
- [3] Х. Гулд, Я.Тобочник. *Компьютерное моделирование в физике*. Мир, М. (1990).
- [4] K. Dettmann, C. Leibfried, K. Schroeder. Spontaneous recombination of Frenkel pairs for electron irradiation // *Phys. status solidi*, **22**, pp. 423-432 (1967).

Ya.P. Saliy, R.Ya. Saliy¹

Space Correlations Effects in the Processes Controlled by Atom Capture

*'Vasyl Stefanyk' Precarpathian University,
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine,
¹'Taras Shevchenko' Kyiv National University,
64, Volodymyrska Str., Kyiv, 0017, Ukraine*

In the present paper some effects of many - particle correlations $A + B \rightarrow A$ are considered. The influence of sink distribution upon the space distribution of immobile and mobile atoms and their capture rates have been studied.