ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 4, № 3 (2004) С. 401-403

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 4, № 3 (2004) P. 401-403

УДК 548.162 : 539.16.04 : 535.37

ISSN 1729-4428

Я.П. Салій, Р.Я. Салій[1]

Моделювання адсорбційного росту епітаксійного острівця

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна
[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64, Київ, 0017, Україна

В даній роботі досліджено ефекти, зумовлені епітаксійним ростом плівкових кластерів. Розраховано фрактальні характеристики пограничної лінії кластера. Вказано на подібність цієї лінії на регулярну криву Коха.

Ключові слова: епітаксія, фрактал, кластер, комп'ютерне моделювання, клітинкові автомати.

Стаття поступила до редакції 15.02.2004; прийнята до друку 30.08.2004.

I. Вступ

Опис фазових переходів, що відбуваються при епітаксійному рості плівки, можна проводити за допомогою клітинкових автоматів. Застосовність такого підходу до означеного процесу обумовлюється наслідуванням структурою плівки, що росте, поверхневої структури підкладинкового матеріалу.

Метою роботи є дослідження морфологічних характеристик острівців, що ростуть з пари на твердій поверхні, а саме закономірностей будови й процесів формоутворення атомних кластерів у їх індивідуальному та спільному розвитку.

Епітаксійний ріст здійснюється через наступні стадії: зародження центру, коалесценція, поверхневе зростання ділянок, ріст товщини плівки [1]. Процес поверхневого росту плівки співставлено з формуванням кластера методом клітинкових автоматів [2]. Двовимірний кластер утворюється на плоскій квадратній сітці з максимальним розміром 256 на 256 клітинок шляхом приєднання нових частинок до наявного кластера. Кластер починає рости з центру поля.

Розглянуто ідеальну модель росту плівки, коли ймовірність заповнення клітинок, що мають хоча б одного з восьми сусідів на квадратній сітці, є максимальною. За іншої ймовірності частинка могла б десорбувати з поверхні.

II. Результати комп'ютерного експерименту

Для моделювання написана програма KLASTER, що візуалізує процес росту кластера. Ряд кінограм представлено на рис. 1.

З рис. 1 видно, що внутрішня частина кластера є суцільним бездефектним середовищем, далі йде дефектна область насичена вакансіями, на межі спостерігаємо фрактальний об'єкт. Видозміну кластера можна характеризувати релаксацією параметра локального порядку (локальною концентрацією частинок), що описує ступінь метастабільності. За цим параметром можна спостерігати еволюцію кластера, а також можна розбити його на згадані вище три ділянки: компактні суцільні ядро й дефектний передповерхневий шар і фрактальний пограничний шар – берегову лінію кластера, що росте.

Справді встановлено, що маса кластера $M_S \sim l^2$, де l його лінійний розмір. Ядро має густину рівну 1, а густина проміжного шару менша за 1.

III. Фрактальна розмірність границі кластера

Для підтвердження фрактальної самоподібності границі в основну програму була включена підпрограма знаходження і підрахунку кількості пограничних комірок кластера, наведених на рис. 2. Слід зауважити, що при обході границі кожна гранична клітинка враховувалась один раз, навіть якщо у неї заходили двічі. Подвійне враховування трохи збільшує довжину берегової лінії. Розрахунок було здійснено для десятка різних згенерованих кластерів. Результати моделювання – характерні значення довжини берегової лінії L і лінійного максимального розміру (радіусу кластера) l –

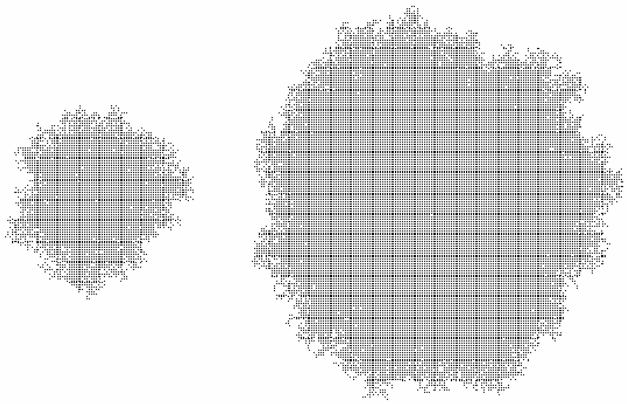

Рис. 1. Кінограми змодельованого на полі 256 на 256 клітинок кластера, що росте і набуває різних характерних розмірів.

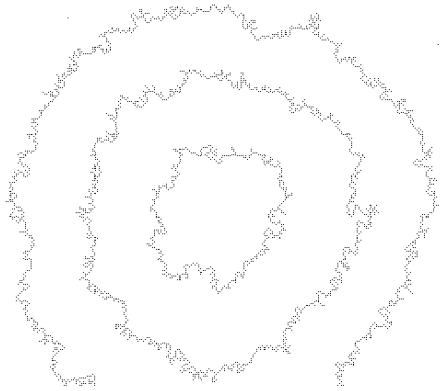

Рис. 2. Кінограми пограничних фрактальних ліній змодельованих кластерів.

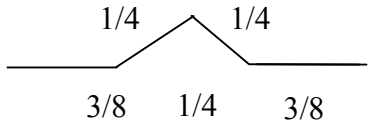

Рис. 3. Регулярна крива Коха розмірністю $d_f = \ln 5 / \ln 4$.

Таблиця

Довжина берегової лінії L в залежності від маштабу *l*

l	$L_{circle} = 2\pi\, l$	$L_{aproxim} = A\, l^{df}$	$L_{theor} = 2\pi\, l^{df}$	$L_{experement,1}$	$L_{experement,2}$
10	63	80	91	71	89
20	126	179	204	194	218
30	188	287	326	265	347
40	251	400	455	433	460
50	314	518	590	522	605
60	377	640	729	646	712
80	502	892	1018	946	1021
100	628	1155	1319	1204	1305
120	754	1426	1630	1415	1448

представлено в таблиці. В цій таблиці також представлено значення для оптимальної апроксимуючої залежності довжини пограничної берегової лінії, отриманої на основі даних для всіх змодельованих кластерів одночасно

$$L_{aproxim} = M_L = 5{,}6059\, l^{1{,}157},$$

а також для правдоподібної теоретичної залежності

$$L_{theor} = 2\pi\, l^{df}.$$

Змодельовані кластери мають ізомеричну форму. Спостерігаємо, як при рості острівці набувають кругоподібної форми з дендритною структурою поверхні. Для порівняння довжина кола

$$L_{circle} = 6{,}2832\, l^{1},$$

де *l* – радіус кола.

Встановлено, що ця замкнута пограничная лінія подібна до регулярного фрактала – кривої Коха, що має розмірність

$$d_f = \ln 5 / \ln 4 = 1{,}160964,$$

форма, якої представлена на рис. 3. Даний регулярний фрактал утворено видаленням на кожному відрізку четвертої частини і одночасним доповненням двома такими частинами у вигляді кута. Збільшення характерного лінійного розміру фрактала у 4 рази збільшує його довжину у 5 разів.

Відома рівностороння трикутна крива Коха має $d_f = \ln 4 / \ln 3$, а килимок Серпінського – $d_f = \ln 8 / \ln 3$ [3].

IV. Висновки

1. При рості кластера спостерігається аморфно-

фрактальний приповерхневий шар, що в міру переміщення границі кристалізується, а границя плівкового острівця, що росте, має фрактальну структуру.

2. Концентрація дефектів всередині кластера залежить від його розміру, границя кластера є джерелом дефектів, вклад у властивості кластера фрактальної частини залежить від розміру кластера.

3. Розмірність границі змодельованого плоского кластера $d_f = 1{,}157$, є близькою до розмірності регулярного фрактала $d_f = \ln5 \backslash \ln4$.

4. Для плоского фракталу можна враховувати різну ймовірність приєднання частинок до кластера в залежності від числа сусідів. Аналогічну задачу можна розв'язати для тривимірного випадку.

Салій Я.П. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла;
Салій Р.Я. – магістр кафедри теоретичної фізики.

[1] С.А. Кукушкин, О.В. Осипов. Морфологическая устойчивость островков, растущих из пара на твердой поверхности // *ФТТ*, **37**(1), сс. 119-123 (1995).
[2] М.Е. Компан. Механизм первичной самоорганизации пористого кремния // *ФТТ*, **45**(5), сс. 902-906 (2003).
[3] Х. Гулд, Я. Тобочник. *Компьютерное моделирование в физике*. Мир, М. (1990).

Ya.P. Saliy, R.Ya. Saliy[1]

Simulation of Adsorption Growth of Epitaxial Cluster

Precarpathian National University named by V. Stefanyk
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine,
[1]Kyiv National University named by Taras Shevchenko,
64, Volodymyrska Str., Kyiv, 0017, Ukraine

In the present paper some effects of epitaxial growth of films clusters are considered. Fractal parameters of braine line of the cluster are calculated. There signed this like is like oh the Kochs curve. This line are signed. The influence of sink distribution upon the space distribution of immobile and mobile atoms and their capture rates have been studied.