

Моделирование структурных фазовых переходов в плёнках

Семенчин Е.А., Галай Е.О.

г. Ставрополь, Ставропольский государственный университет

В работе аналитическими и численными методами изучается физический процесс образования пленки в результате газовой или жидкостной эпитаксии на кристаллическую подложку.

Совокупность частиц неупорядоченной фазы можно рассматривать как ансамбль бозе-частиц. При температурах ниже некоторой критической происходит осаждение части частиц системы на подложку в состоянии с нулевым импульсом, так называемая бозе-конденсация в поле псевдопотенциала подложки. В результате на кристаллической поверхности образуются зародыши новой фазы, происходит фазовый переход первого рода [1, 2].

Предложена динамическая модель квазидвумерных решеток, в которой учтены решеточные ангармонизмы и ангармоническое взаимодействие плёнки с подложкой. Гамильтониан системы представлен в виде суммы одночастичного потенциала поля подложки и потенциала двухчастичного взаимодействия атомов плёнки с атомами подложки. Это дает возможность описывать «метастабильные» положения атомов в «метастабильных» локальных минимумах одного из потенциалов, а значит описывать метастабильные состояния решетки, связанные со структурно-фазовым переходом первого рода, близкого ко второму.

Несохранение числа частиц неупорядоченной системы, связанное с наличием поля подложки, приводит к появлению отличных от нуля средних $\langle a_{k_1}^+ a_{k_2} \rangle$, определяющих концентрацию частиц в газовой фазе, а также аномальных средних $\langle a_{k_1} a_{k_2} \rangle$ которые при $k=0$ определяют концентрацию осаждённых частиц – конденсата. Для аномальной функции Грина (ФГ)

$$\Gamma_{kk'}(\omega) = \langle \langle a_k^+(t_1) a_{k'}^+(t_2) \rangle \rangle_{\omega}$$

получено уравнение

$$\Gamma_{kk'}(\omega)[\omega + \varepsilon] = \Delta^+ G_{kk'}(\omega),$$

где

$$\Delta^+ = -\frac{1}{v} \sum V(k_1 - k_1') \langle a_{k_1}^+(t_1) a_{k_2}^+(t_1) \rangle.$$

Здесь ε – энергия одночастичных возбуждений.

Решая совместно систему уравнений для нормальной

$$G_{kk'}(t_1, t_2) = \langle \langle a_k(t_1) a_{k'}^+(t_2) \rangle \rangle$$

и аномальной ФГ находим для энергетической щели в спектре аномальной ФГ уравнение

$$\Delta + \sum V(k_1 - k_1') \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} \text{th} \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{2T} = 0.$$

Δ имеет смысл энергетической щели в спектре возбуждений монослоя кристаллического конденсата на подложке. Появление $\Delta \neq 0$ является критерием начала конденсации несоизмерной фазы на кристаллической подложке.

Численное решение уравнения для энергетической щели Δ было проведено с помощью пакета MathCAD.

Экспериментальное подтверждение полученных результатов затруднено из-за сложности определения критических параметров в момент появления зародышей новой фазы. Но если отождествить ширину щели Δ с величиной активационного барьера адсорбционно-десорбционных процессов, то с помощью уравнения для энергетической щели Δ можно проследить зависимость энергии активации от степени покрытия.

Следует отметить, что формирование субмонослойных плёнок носит доменный характер, структура доменов зависит от величины покрытия, и эта зависимость носит пороговый характер.

Такой вывод позволяет предположить, что во всём интервале Δx_i , в пределах которого энергия активации меняется монотонно, латеральное взаимодействие между частицами плёнки оказывается неизменным, а некоторое изменение энергии активации в пределах интервала Δx_i связано с влиянием поля подложки. Скачкообразное же изменение энергии активации, свидетельствующее о структурных изменениях в плёнке, связано со скачкообразным изменением энергии двухчастичного взаимодействия. С учётом этого факта можно построить зависимость энергии активации от параметров двухчастичного взаимодействия и поля подложки (см. рис. 1).



Рисунок 1. Зависимость энергии активации десорбции от степени покрытия.

Сравнение полученного результата с экспериментальным [4] показывает, что для расчетной кривой в пределах одного монотонного участка изменение энергии активации коррелирует с изменением среднего поля подложки.

Литература

1. Кукушкин С.А., Осипов А.В. Процессы конденсации тонких пленок. УФН, 1998, 168, 10, с.1083-1116.

2. Децик В.Н., Каптелов Е.Ю. Кукушкин С.А., Осипов А.В., Пронин И.П. Кинетика начальной стадии фазового перехода первого рода в тонких пленках ФТТ, 1997, т.39, №1, с.121-126.
3. Адхамов А.А., Лебедев В.И. Применение метода функций Грина в классической статистической механике. – Душанбе.: «Дониш», 1975. – 196 с.
4. Крачино Т.В., Кузьмин М.В., Логинов М.В., Митцев М.А. Начальные стадии формирования границы раздела Yb-Si(III) ФТТ, 1997, т.39, №2, с.256-263.