

А.С. Долгов, Н.В. Стеценко

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского  
“Харьковский авиационный институт”, Украина*

Поступила в редакцию 25.07.2009

Теоретически рассматривается кинетика атомов в монослое на поверхности. В рамках модели, допускающей произвольные масштабы взаимодействия мигрирующих атомов с подложкой и между собой, найдены соотношения, полностью определяющие структуру микрораспределений на поверхности и ее эволюции при изменении температуры в условиях внешних воздействий.

Выяснены свойства монослоя как колебательной структуры. Указываются возможности применения информации о динамике атомов в кластерных образованиях для целей диагностики поверхности и управления микроструктурой поверхностных распределений.

Обсуждаются качественно обособленные различные варианты условий взаимодействия изменения микрораспределений во времени.

**Ключевые слова:** кинетика атомов в монослое, поверхность, мигрирующие атомы, микрораспределения, кластерные образования, температура.

Теоретично розглядається кінетика атомів у моношарі на поверхні. У рамках моделі, яка припускає довільні масштаби взаємодії мігруючих атомів із підложкою та поміж собою, знайдено співвідношення, які повністю визначають структуру мікророзподілів на поверхні та її еволюції під час зміни температури та в умовах зовнішньої дії.

З'ясовані властивості моношару як коливальної структури та вказуються можливості використання інформації про динаміку атомів у кластерних формуваннях з ціллю діагностики поверхні та управління микроструктурою поверхневих розподілів.

Розглядаються також якісно відокремлені різні варіанти умов взаємодії та зміни мікророзподілів у часі.

**Ключові слова:** кінетика атомів в моношарі, поверхня, мігруючі атоми, мікророзподіл, кластерні формування, температура.

Atoms' surface kinetics in the monolayer is considered theoretically. In the model framework which allows existing free scales of migrate atoms' interactions and their interaction with substrate the relations defining microdistributions' structure on the surface and its evolution during temperature variation in conditions of outward influences are found.

Monolayer characteristics as oscillating structure have been cleared. Application possibilities of atoms' dynamics information in cluster formations for surface diagnostic and microstructure managing of the surface distributions are shown.

Qualitatively isolated different interactions' conditions variants of microdistributions' variations during the time are discussed.

**Keywords:** atom kinetics in monolayer, surface, migrating atoms, microdistribution, cluster formations, temperature.

## ВВЕДЕНИЕ

Вопрос о нестационарных процессах в атомных поверхностных покрытиях возникает в связи с необходимостью выяснения последствий изменения условий миграции поверхностных атомов вследствие изменения температуры, а также как результат воздействия иных факторов (см. [1 – 3]). Ясно, что темп и особенности перестроек атомных распределений зависят от масштаба и быстроты изменения внешнего воздействия (температуры), что создает широкий спектр вариаций

отклика структуры. Особый интерес представляет ситуация, когда продолжительность этапа изменения температуры существенно уступает характерному времени релаксационного последствия в слое атомов. Для не слишком высоких температур, названное предположение практически не создает ограничений. При этом изменение условий может считаться мгновенным, а вся предыстория фиксироваться заданием начального состояния. Дело не только в формальном упрощении анализа: следует думать, что такой

подход позволяет выяснить релаксационные свойства объекта изучения наиболее отчетливо.

Комплекс характеристик, связанных с поверхностным моноатомным слоем обширен (например, [4]), в силу чего сама проблема нестационарных состояний в слое многоаспектна, что также предопределяет предпосылки разных вариантов использования названных процессов.

Имеется некоторое число публикаций, где вопросы нестационарной кинетики на поверхности изучались с различных позиций как теоретически, так и экспериментально [5 – 7].

В настоящей работе рассматриваются равновесные и неравновесные состояния монослоя в условиях взаимодействия между атомами произвольного масштаба и динамические свойства таких структур в рамках гармонического приближения [8].

**ИСХОДНЫЕ КОНЦЕПЦИИ**

Допущение о короткодействующем взаимодействии мигрирующих атомов, существующем только в случае ближайшего соседства, позволяет ограничиться введением только одной константы взаимодействия. Для квадратной сетки разрешенных позиций рассматриваемых атомов на поверхности подложки возникают макроскопически однородные и изотропные распределения. При этом анализ сводится к выяснению особенностей микрораспределений атомов, то есть к определению корреляций относительного размещения для фиксированного уровня средней степени заполнения возможных позиций  $\Phi_1$ . Таким образом, в качестве искомым величин выступают вероятности реализации многоузельных размещений всевозможных видов.

Наиболее показательны в этом отношении вероятности двухузельных конфигураций  $\Phi_{11}$ ,  $\Phi_{10}$ ,  $\Phi_{00}$ , где индексы символизируют заполненные и пустые узлы. Записанные величины взаимообусловлены, так что достаточно определить одну из них, считая при этом величину  $\Phi_1$  параметром. Кроме того, двухузельные вероятности непосредственно позволяют вычислить трехузельные, четырехузельные и

т.д., т.е. определить полную картину микрораспределений в соответствии с правилами

$$\Phi_{100} = \frac{\Phi_{10}\Phi_{00}}{\Phi_0}, \tag{1}$$

и т.д.

Заметим, что соответствия вида (1) являются точными в условиях равновесия и (или) локально, а в неравновесных переходных режимах могут рассматриваться как способ расцепления совокупности кинетических уравнений для вероятностей всевозможных конфигураций.

Следует принять во внимание, что возникновение ситуации двух соседних заполненных позиций в условиях короткодействия связано с перескоками атомов в конфигурациях

вида  $101^*$  и сводимых к такой форме (здесь перескок справа налево, причем звездочки означают дозволенность как наличия, так и отсутствия атома в соответствующей позиции).

Сходным образом, разрушение конфигурации 11 определяется перескоком (“отскоком!”)

в конфигурациях типа  $110^*$ .

**УРАВНЕНИЯ МИГРАЦИИ**

С учетом представлений (1) и статистических весов конфигураций различных видов уравнение нестационарной кинетики записывается так

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi_{11}}{d\tau} \equiv -\frac{d\Phi_{01}}{d\tau} = & 6v^3 \frac{\Phi_{01}^2\Phi_{11}^3}{\Phi_0\Phi_1^3} + 18v^2 \frac{\Phi_{01}^3\Phi_{11}^2}{\Phi_0\Phi_1^3} + \\ & + 18v \frac{\Phi_{01}^4\Phi_{11}}{\Phi_0\Phi_1^3} + 6 \frac{\Phi_{10}^5}{\Phi_0\Phi_1^3} - 6v^3 \frac{\Phi_{10}\Phi_{11}^3}{\Phi_1^3} - \\ & - 12v^2 \frac{\Phi_{10}^2\Phi_{11}^2}{\Phi_1^3} - 6v \frac{\Phi_{10}^3\Phi_{11}}{\Phi_1^3} \end{aligned} \tag{2}$$

где  $\tau$  – безразмерное время,  $v$  – фактор взаимодействия, причем  $v > 1$  для случая отталкивания между соседствующими атомами (ускорение перескоков) и  $v < 1$  в противоположном случае. Нет оснований отличать величину  $v$  от гиббсовского фактора, т.е.

, где смысл символов не тре-

бує пояснений. Наявність множників  $v$ ,  $v^2$ ,  $v^3$  в рівнянні (2) відповідає стрибкам, передбачаючим подолання зв'язи з одним, двома або трьома сусідніми атомами відповідно.

Рівняння (2) зводиться до виду

$$\frac{d\varphi_{10}}{d\tau} = -6 \frac{(1-v)^3}{\varphi_1(1-\varphi_1)} \varphi_{10} \left( \varphi_{10} + \frac{v}{1-v} \varphi_1 \right)^2 \times \quad (3)$$

де  $y_{1,2} = -\frac{v}{2(1-v)} \pm \sqrt{\frac{v^2}{4(1-v)^2} + \frac{v}{1-v} \varphi_1(1-\varphi_1)}$ . (4)

Рівняння (3) інтегрується стандартними методами, що дає

$$\left( \frac{A}{a} + \frac{B}{a+y_1} + \frac{C}{a+y_2} \right) \left( \frac{1}{a+y} - \frac{1}{a+y_0} \right) + \frac{C}{(a+y_2)^2} \ln \frac{(y-y_2)(y_0+a)}{(y+a)(y_0-y_2)} = -6 \frac{(1-v)^3}{\varphi_1(1-\varphi_1)} \tau, \quad (5)$$

де  $y \equiv \varphi_{10} = \varphi_{01}$ ,  $y_0 \equiv \varphi_{10}$ ,  $a = \frac{v}{1-v} \varphi_1$ , (6)

$$A = (y_1 y_2)^{-1}, \quad B = [y_1 (y_1 - y_2)]^{-1}, \quad C = [y_2 (y_1 - y_2)]^{-1}, \quad (7)$$

величини  $y_1$ ,  $y_2$  визначені вираженням (4), причому індекс "1" відповідає знаку "+" перед радикалом.

Відношення (5) разом з позначеннями (4, 6, 7) дозволяє розглянути ряд окремих випадків.

### СПЕЦІАЛЬНІ ВАРИАНТИ НЕСТАЦІОНАРНОЇ КІНЕТИКИ

Варіант  $v = 1$  (лише кінематичне взаємодія) допускає точне представлення рівності (5) у вигляді явної залежності. По-

лучається 
$$y = \frac{y_0 (\varphi_1 - \varphi_1^2) e^{6\tau}}{y_0 (e^{6\tau} - 1) + \varphi_1 - \varphi_1^2}. \quad (8)$$

Видно, що незалежно від характеру вихідного розподілу величина  $\varphi_{01}$  асимптотично наближається до значення  $\varphi_1(1-\varphi_1)$ , що, в свою чергу, задає рівень  $\varphi_{10} = \varphi_1^2$ . Крім того, вихідний рівень  $y_0$  фізично обмежений: значенням  $\varphi_1$ , для розрідженого поверхнового шару, і величиною порядку  $N^{-1}$ , де  $N$  – кількість позицій у відповідному напрямку, якщо вихідний стан представляє собою щільний згусток. В останньому випадку наближення до рівноважного рівня обмежене переміщенням (відхиленням) атомів до краю згустка, в силу чого суттєво зменшується. (Аналогічне обставина відзначено в роботі [6]). Якщо для вихідного розподілу випадкового характеру тривалість наближення до асимптотичного рівня порядку часу декількох стрибків, то в обговореній ситуації ця тривалість у використаному масштабі часу порядку  $\ln N$ .

У варіанті  $v \rightarrow 0$  відношення (5) дає наближене вираження

$$y \approx \frac{y_1 (y_0 + v\varphi_1) + v\varphi_1 (y_0 - y_1) e^{-\gamma\tau}}{y_0 + v\varphi_1 - (y_0 - y_1) e^{-\gamma\tau}}, \quad \gamma = 12v^2\varphi_1(1-\varphi_1). \quad (9)$$

Формула (9) визначає асимптотичне наближення до значення  $y_1$ , яке при малих  $v$  збігається приблизно з  $(v\varphi_1(1-\varphi_1))^{1/2}$ . Відносно невисокого значення параметра інтенсивності релаксационних процесів ( $\gamma \sim v^2$ ) визначається, по-видимому, тим, що виникнення малих (двохузельних) клас-

терів, де  $\varphi_{01} \approx \frac{1}{2} \varphi_1$ , зв'язує партнерів, суттєвим чином уповільнює процес подальших перебудов, що відповідають наближенню до невисокого асимптотичного рівня  $y_1$ . При цьому наближення середніх рівнів заповнення вузлів  $\varphi_1$  або аналогічних рівнів вакантності  $(1-\varphi_1)$  до нуля різко звужує діапазон допустимих рівнів  $y_0$ , і значення  $y_0$  виявляється відносно близьким до рівноважного, в силу чого тривала нерівноважність стану ( $\gamma \rightarrow 0$ ) ускладнює спостереження асимптотики.

Вариант  $v > 1$  (отталкивание) вносит новые особенности. В широком временном диапазоне, не включающем только самый ранний этап эволюции распределения, наибольший вклад принадлежит первому слагаемому (5) (главным образом потому, что в обозначенной ситуации все слагаемые могут достигать больших значений, но первое, в отличие от прочих, не является логарифмическим). Усиленное условие  $v \gg 1$ ,  $\varphi_1 \ll 1$  определяет следующий вид перестройки исходного распре-

$$y \approx \frac{y_0 + \gamma \varphi_1 (\varphi_1 - y_0) \tau}{1 + \gamma (\varphi_1 - y_0) \tau},$$

$$\gamma = 6v^3 \varphi_1^2 (1 - \varphi_1). \quad (10)$$

В силу оговоренного характера приближений форма (10) является аппроксимационной для начального участка эволюции ( $\gamma \tau \leq 1$ ) и приближается к точной зависимости при  $\tau \rightarrow \infty$ . Приближение  $y$  к уровню  $\varphi_1$  свидетельствует о распаде сгустков, если таковые существовали в исходном состоянии.

### МОНОСЛОЙ КАК КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА

Перестройка распределений атомов, создающих поверхностный монослой, сопряжена с изменением всего комплекса характеристик слоя и, шире, изменением свойств поверхности образца. К числу таковых, в частности относятся эффекты, связанные со спектром частот поверхностных колебаний. В общем случае поверхностный слой представлен фракцией одиночных адатомов и набором изолированных сгустков случайных форм и размеров. Тем самым упрощенно структуру спектра частот моноатомного слоя можно представлять состоящей из вырожденного “одноатомного” уровня с кратностью, определяемой числом изолированных атомов и полосы уровней, принадлежащих сгусткам. Дополнительно должны обнаруживаться вырожденные уровни, определяемые наличием мелких кластеров – двухатомных, трехатомных и т.д.

Соотношение вкладов названных составляющих в наблюдаемые характеристики целиком определяется структурой размещения атомов в слое, т.е. вероятностями реализаций всевозможных атомных конфигураций и мо-

жет радикально изменяться в эволюциях, обсуждаемых в данной работе. Обращение к конкретным формам взаимодействий атомов делает картину более рельефной и выявляет дополнительные особенности.

Имеются работы [8, 9], где устанавливается сильная анизотропия миграции адатомов, обусловленная различными факторами. Имея в виду данное обстоятельство, обращаемся к одномерной модели с гармоническим взаимодействием атомов как с атомами подложки, так и между собой. Простейшая схема взаимодействия отвечает уравнениям движения [10, 11]

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} = -\omega_0^2 x_n, \quad (11)$$

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} = -\omega_0^2 x_n + \frac{\omega_1^2}{4} (x_{n-1} - 2x_n + x_{n+1}) \quad (12)$$

для одиночного атома и для атомов в кластере соответственно, причем  $\omega_0^2$  – представляет взаимодействие с подложкой, а  $\omega_1^2$  – в атомной цепи;  $x_n$  – смещение атома номера “ $n$ ”.

Таким образом, качественно различаются колебания отдельных атомов с частотой  $\omega_0$  и зонные колебания, представляемые дисперсионным соотношением

$$\omega = \left( \omega_0^2 + \omega_1^2 \sin^2 \frac{s}{2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad -\pi < s < \pi. \quad (13)$$

Для цепочек атомов небольшой длины посылки, предполагающие макроскопическую протяженность и призванные лишь обеспечить правильное число степеней свободы – бегущие волны, циклические граничные условия – по меньшей мере, неудобны. Можно убедиться (подробнее об этом в книге [12]), что набор собственных колебательных состояний объекта произвольной длины со свободными концами, включая цепи из одного, двух и т.д. атомов, может представляться функциями вида

$$x_n \sim \cos\left(\frac{2n-1}{2}s\right) \cos(\omega t), \quad (14)$$

где  $\omega$  определяется общей формулой (13), а отбор значений системообразующего параметра  $s$  задается правилом

$$s = \frac{\pi}{N}l, \quad l = 0, 1, \dots, N-1, \quad (15)$$

где  $N$  – число атомов в изолированном сгустке. Заметим, что соответствия (14, 15) точные и сохраняют свой вид для разных форм линейного взаимодействия между атомами (формулы (11 – 13) – пример для иллюстрации).

### СПЕКТР ЧАСТОТ КОЛЕБАНИЙ ПОВЕРХНОСТНОГО МОНОСЛОЯ

Согласно (15) атомные сгустки (цепочки) разной длины обладают индивидуальными наборами значений собственной частоты в пределах

диапазона  $\omega_0 \dots (\omega_0^2 + \omega_1^2)^{\frac{1}{2}}$ . Указанные

границы остаются неизменными для всевозможных размещений атомов, но распределение состояний в этих пределах варьируется в зависимости от наличного ассортимента цепочек и их эволюции. Форма плотности состояний изменяется от  $\sim \delta(\omega - \omega_0)$  в условиях изолированности всех атомов до вида

$$\sim \omega \left[ (\omega^2 - \omega_0^2)(\omega_0^2 + \omega_1^2 - \omega^2) \right]^{-\frac{1}{2}},$$

отвечающего объекту неограниченной протяженности.

Количество колебательных состояний, соответствующих граничной частоте  $\omega_0$ , нормированное на единицу, в общем случае представляется выражением  $P_1 = \varphi_{010} + \varphi_{0110} + \varphi_{01110} + \dots$ , что с учетом соответствий (1) дает

$$P_1 = \varphi_{01}. \quad (16)$$

В отсутствие сгустков величина  $P_1$  совпадает с  $\varphi_1$ , а в противоположном случае стремится к нулю.

Параметр  $\omega_0$  – единственное значение частоты, реализуемое в изолированных сгустках любой длины и, одновременно, единственное значение частоты, присущее фракции одиночных атомов. Все сгустки, начиная с двухузельных, создают дополнительные частотные уровни. При этом в цепочках, число атомов в которых кратно такому же количеству для более компактных сгустков, наряду с дополнительными частотными модами реализуются все состояния указанных относительно малых объектов.

Сходным образом, набор частот цепочки, длина которой представлена одним из простых чисел, отсутствует в более коротких цепях (исключая указанный выше предельный случай  $\omega = \omega_0$ ) и воспроизводится только в цепочках удвоенной, утроенной и т.д. длины. Все сгустки четной длины могут колебаться

с частотой  $\sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{2}\omega_1^2}$ , а те, где количество атомов кратно трем, содержат частоты

$$\sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_1^2} \quad \text{и} \quad \sqrt{\omega_0^2 + \frac{3}{4}\omega_1^2} \quad \text{и т.д.}$$

При этом общее количество колебательных состояний первого из указанных значений

$$P_2 = \varphi_{0110} + \varphi_{01110} + \varphi_{011110} + \dots \frac{\varphi_{01}\varphi_{11}}{\varphi_1 + \varphi_{11}}, \quad (17)$$

а для двух других  $P_3 = \varphi_{01110} + \varphi_{0111110} +$

$$+ \varphi_{01111110} + \dots \frac{\varphi_{11}^2}{\varphi_1^2 + \varphi_1\varphi_{11} + \varphi_{11}^2} \varphi_{01}.$$

Общее выражение для числа колебательных состояний (яркость, интенсивность уровня) семейства, связанного с некоторой минимальной длиной  $N$ , таково

$$P_N = \varphi_{01}^2 \frac{\varphi_{11}^{N-1}}{\varphi_1^N - \varphi_{11}^N}. \quad (18)$$

Соотношение уровней интенсивности частот, продуцированных исходными конфигурациями, длины которых различаются на единицу, согласно (18) таково

$$\varphi_{11} \frac{\varphi_1^{N-1} - \varphi_{11}^{N-1}}{\varphi_1^N - \varphi_{11}^N}. \quad (19)$$

Для не слишком малых значений  $N$  роль второго слагаемого числителя и знаменателя записанной дроби мала даже в случае, когда  $\varphi_{11}$  мало уступает уровню  $\varphi_1$ . Таким образом, выражение (19) близко к единице, когда  $\varphi_{11} \rightarrow \varphi_1$ , т.е. вклады частот, продуцируемых цепочками сходной протяженности, сопоставимы. Это значит, что общая структура спектра частот близка к тому, что определяет традиционная схема. Если же  $\varphi_{11} \ll \varphi_1$ , то имеет место крутое снижение интенсивности линий с увеличением  $N$ . При этом, может

быть приблизительно указан уровень  $N = N_0$ , разделяющий зоны набора дискретных уровней и области практически непрерывного спектра. Величина  $N_0$  оценивается требованием  $\varphi_{11}^{N_0} \cong \alpha \varphi_1^{N_0}$ ,  $\alpha \approx (1 \div 3) \cdot 10^{-1}$ .

**ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ В МОНОСЛОЕ**

В условиях  $\varphi_{11} \ll \varphi_1$  (отсутствие длинных цепочек) спектр дискретен и представлен только уравнениями мельчайших кластеров. Изменение интенсивностей соответствующих частот и их сопоставление позволяет определить структуру размещений атомов, что, в свою очередь, несет информацию об особенностях их взаимодействия и миграции.

Инфракрасное воздействие на поверхность может служить инструментом селективной перестройки распределения атомов. В случае существенного преобладания мелких сгустков поглощательная способность поверхностного покрытия будет сильной функцией частоты, что соответствует существенному поглощению в окрестности выделенных частот и прозрачности в промежуточных зонах. При этом воздействие на одной из резонансных частот будет оказывать влияние только на атомы сгустков определенного вида (оказываясь малоэффективным для иных кластеров). Так, скажем, воздействие с

частотой  $\sqrt{\omega_0^2 + \frac{3}{4}\omega_1^2}$  способно вести к значи-

тельной раскачке атомов в цепочках, длина которых кратна трем, при игнорировании сгустков иных видов. Достаточно длительное воздействие может приводить к разрушению упомянутых образований, что открывает возможности целенаправленных перестроек микрораспределений макроскопическим воздействием, что может явиться одним из инструментов нанотехнологии. При этом могут быть реализованы неравновесные распределения, возникновение которых иным путем едва ли возможно. Понимается перераспределение под действием внешних факторов и эволюция распределений в сторону равновесия – это конкурирующие процессы, в оценке ролей которых решающее значение имеет сопоставление интенсивностей генерации новых неравновесных состояний и релаксационных процессов, темп и особеннос-

ти которых для разных ситуаций задается формулами (8 – 10). Результирующим эффектом может явиться и коренная перестройка исходного состояния, и его неуязвимость, и, разумеется, всевозможные гибридные состояния.

Одномерный вариант нестационарной кинетики в условиях кинематического взаимодействия ( $\nu = 1$ ) в соответствии с (16, 17) приводит к соотношениям

$$P_1 = \frac{y_0 \varphi_1 (1 - \varphi_1) e^{2\tau}}{y_0 e^{2\tau} + \varphi_1 - \varphi_1^2 - y_0}, \quad (20)$$

$$(21)$$

Сопоставление асимптотических (равновесных) уровней  $P_1$  и  $P_2$

$$(22)$$

непосредственно определяет плотность поверхностного монослоя.

Еще более отчетливую и детальную информацию об особенностях структуры дает наблюдение динамики изменения  $P_1, P_2$ . Видим, что  $P_1 > P_2$ , но вариации  $P_2$  в нестационарных режимах, как правило, происходят более стремительно и отвечают более существенным относительным изменениям. Формулы (20, 21) соответствуют, в частности, режиму относительно высоких температур, когда параметр взаимодействия  $\nu$  приближается к единице, как в случае притяжения, так и при отталкивании. При этом в качестве исходного режима, задающего начальное значение  $y_0$ , может подразумеваться равновесный режим для более низкой температуры, который для тех же мигрирующих атомов определяет значения  $\nu$ , далекие от единицы, и соответствующий характер распределения.

В случае отталкивания ( $\nu > 1$ ) равновесный уровень  $\varphi_{01}$  близок к  $\varphi_1$  (при условии  $\varphi_1 < 1/2$ ). Принимая  $y_0 = \varphi_1$ , получаем

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{\varphi_1 (e^{2\tau} - 1)}{(1 + \varphi_1) e^{2\tau} - 2\varphi_1},$$

что отвечает изменению от нуля до значения (22), сопоставимого с  $\varphi_1$ . При этом абсолют-

ное изменение величины  $P_1$  соответствует умеренному снижению от  $\phi_1$  до  $\phi_1(1 - \phi_1)$ .

В случае притяжения соседствующих атомов в качестве исходного значения  $y_0$ , отвечающего режиму охлаждения, следует принять величину порядка  $l^{-1}$ , где  $l$  – средняя длина цепочек (сгустков), выраженная количеством занятых узлов. В этих условиях начальный этап развития процесса после изменения температуры, отвечающего приближению  $v$  к единице, соответствует относительно низким уровням интенсивностей  $P_1$  и  $P_2$  вплоть до сроков  $\tau \approx \ln(\phi_1 l)$ , что связано с усложненным характером распада длинных цепочек (как в статье [6]). Дальнейшее перераспределение атомов отвечает более значительным изменениям этих величин с приближением к равновесному уровню. Показательно, что в отличие от случая  $v > 1$ , соотношение интенсивностей  $P_1$  и  $P_2$  меняется мало. Это обстоятельство дополняет набор приемов, позволяющих диагностировать свойства поверхностного покрытия путем наблюдения динамики изменения интенсивностей выделенных колебательных возбуждений объекта.

В общем случае величины  $P_1, P_2$ , несут информацию о степени покрытия и предпочтительном характере размещения атомов, создающих монослой, а темп изменения (величина  $\gamma$ ) является количественной характеристикой механизма перемещения по поверхности.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выше показано, что миграция атомов приводит к формированию специфической микроструктуры монокристаллического слоя, которая, в свою очередь, определяет динамические свойства монослоя. Изменение температуры влечет за собой релаксационную перестройку структуры монослоя в направлении приближения к характеристикам нового равновесного состояния.

Эффект взаимодействия между атомами, образующими слой, в случае притяжения увеличивает масштаб эволюционных изменений микроструктуры слоя и уменьшает в противоположном случае.

Расширение спектра частот и ослабление дискретизации колебаний атомов слоя – прямые свидетельства кластеризации монослоя, а увеличение кратности вырождения низкочастотных состояний отвечает распаду кластеров и формированию относительно рыхлого почти однородного покрытия.

Заметим еще, что построения данной работы допускают значительное развитие как в применении к объектам более сложной геометрии, так и в отношении детализации соответствий между особенностями микрораспределений и наблюдаемыми характеристиками.

Очевидным осложнением экспериментального определения спектра колебаний пленки является то, что эти колебания происходят на фоне более мощных процессов в примыкающем объеме. Основой идентификации именно “пленочных” частотных мод может служить температурная обусловленность частотного спектра. Модификация спектра частот поверхностного слоя с изменением температуры весьма существенна, в то время как в массиве при этом в соответствии с бозевской статистикой происходит изменение фоновой плотности, но не плотности состояний.

Впрочем, выполненные разработки указывают на целесообразность эмпирического подбора технологических режимов, обеспечивающих те или иные потребности, даже и без таких тонких исследований, как определение частотного спектра. Варьирование структуры поверхностного монослоя при изменениях температуры и, особенно, при селективном инфракрасном воздействии определяет весьма серьезные ресурсы изменения характеристик поверхности: оптических, эмиссионных, прочностных и др. При этом названные изменения могут иметь характер гистерезиса. Также доступна организация режима контролируемого изменения свойств во времени, что также может быть полезно при создании приборов или в некоторых технологических процессах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Старк Д.П. Диффузия в твердых телах. – М.: Мир, 1980. – 240 с.

2. Зенгуил Э. Физика поверхности. – М.: Мир, 1990. – 563 с.
3. Праттон М. Введение в физику поверхности. – М.: Мир, 2000. – 256 с.
4. Кукушкин С.А., Осипов А.В. Процесс конденсации тонких пленок//УФН – 1998. – № 10.
5. Heinrichs S., Dieterich W., Maass P. Modeling epitaxial growth of binary alloy nanostructures on a weakly interacting substrate//Phys. Rev. B. – 2007. – № 75.
6. Koh S.J., Ehrlich G. Stochastic ripening of one-dimensional nanostructures//Phys. Rev. B. – 2000. – № 62.
7. Knoll A., Weismann D., Gotsmann B., Duerig U. Relaxation Kinetics of nanoscale Indents in a Polymer Glass//Phys. Rev. Lett. – 2009. – № 102.
8. Koh S.J., Ehrlich G. Self-Assembly of One-Dimensional Surface: Long-Range Interactions in the Growth of Ir and Pd on W(110)//Phys. Rev. Lett. – 2001. – № 87.
9. Tsvilin D.V., Stepanyuk V.S., Hergert W., Kirschner J. Effect of mesoscopic relaxations on diffusion of Co adatoms on Cu(111)//Phys. Rev. B. – 2003. – № 68.
10. Марадудин А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. – М., 1968.
11. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. – К., 1981.
12. Долгов А.С. Физика твердого тела. – Харьков: ХАИ, 2004.

© А.С. Долгов, Н.В. Стеценко, 2009.