# КВАНТОВОСТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ ПЛЁНКИ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКЕ

Галай Е.О.

*Ставропольский государственный университет*

*г. Ставрополь, Россия*

Galail@mail.ru

Развитие тонкоплёночных технологий привело к прогрессу в микро- и оптоэлектронике, определяющему лицо современной информационной цивилизации. При выращивании плёнок возникает проблема построения моделей кинетики фазовых переходов первого рода в двухфазных системах.

Рассмотрим процесс образования пленки в результате газовой или жидкостной эпитаксии на кристаллической подложке. Совокупность частиц неупорядоченной фазы можно рассматривать как динамическую систему частиц, распределённых в пространстве случайным образом и находящихся в состоянии термодинамического равновесия с кристаллической подложкой. Частицы могут находиться в сколь угодно большом количестве в одном состоянии, для них не существует запрета Паули, то есть такую систему 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.

Несохранение числа частиц неупорядоченной системы, связанное с наличием поля подложки, приводит к появлению отличных от нуля средних $\left\langle a_{k_1}^{+} a_{k_2} \right\rangle$, определяющих концентрацию частиц в газовой фазе, а также аномальных средних $\left\langle a_{k_1} a_{k_2} \right\rangle$ которые при k=0 определяют концентрацию осаждённых частиц – конденсата. Для аномальной функции Грина (ФГ) $\Gamma_{kk'}(\omega) = \left\langle\left\langle a_k^{+}(t_1) a_{k'}^{+}(t_2) \right\rangle\right\rangle_{\omega}$ получено уравнение $\Gamma_{kk'}(\omega)[\omega + \varepsilon] = \Delta^{+} G_{kk'}(\omega)$, где

$\Delta^{+} = -\frac{1}{\nu}\sum V(k_1 - k_1')\langle a_{k_1}^{+}(t_1) a_{k_2}^{+}(t_1)\rangle$. Здесь ε – энергия одночастичных возбуждений.

Решая совместно систему уравнений для $G_{kk'}(t_1, t_2) = \langle\langle a_k(t_1) a_{k'}^{+}(t_2)\rangle\rangle$ – нормальной и аномальной ФГ находим для щели в спектре аномальной ФГ уравнение $\Delta = -\sum V(kk)\frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} th\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{2\Theta}$. $\Delta$ имеет смысл щели в спектре возбуждений монослоя кристаллического конденсата на подложке, преодоление которой необходимо для начала образования плёнок. Таким образом, появление $\Delta \neq 0$ является критерием начала конденсации неупорядоченной фазы на кристаллической подложке.

Кроме парного взаимодействия частиц конденсата $V(kk)$ в спектре возбуждений ε содержится псевдопотенциал взаимодействия частиц конденсата с подложкой, зависящий от температуры подложки.

Самоорганизация наноструктур носит пороговый характер. В докритическом режиме флуктуации затухают, а выше порога, они усиливаются и делают устойчивым новый режим, приводящий к появлению плёночных структур. Соотношение для щели даёт спинодаль появления тонких плёнок на поверхности подложки. Проведём расчёт критических температур возникновения щели в спектре возбуждений конденсата при росте пленки Zr на поверхности кристалла Zr.

Для получения фазовой диаграммы появления плёночной структуры при различных интенсивностях межатомных взаимодействий A и внутриплоскостных B построим график критической температуры в плоскости констант A и B при температуре подложки 700 К.

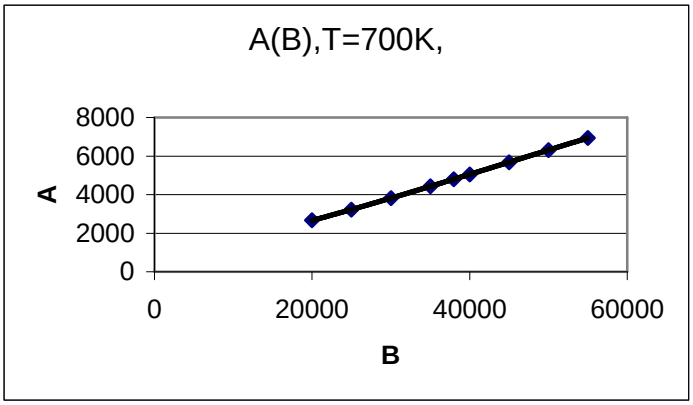


Рис. 1. Связь критической температуры с силовыми константами

Рис. 1 позволяет оценить влияние внутриплокостных и межплоскостных взаимодействий на температуру появления зародышей плёночных структур.