

наличии четкой границы поглощения для образцов пленок MoS_2 , нанесение которых осуществлялось при наличии внешнего магнитного поля, что свидетельствует об их более высоком структурном совершенстве. Также обнаружено влияние внешнего магнитного поля на скорость роста пленок, при одинаковом времени осаждения приводящее к существенному увеличению толщины пленок (на 20-30%) для случаев наличия продольного магнитного поля с индукцией примерно 0.3 Тл у поверхности подложек в процессе нанесения.

Литература

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* 306 (2004) 666.
2. D.G. Papageorgiou, I.A. Kinloch, R.J. Young, Mechanical properties of graphene and graphene-based nanocomposites, *Prog. Mater. Sci.* 90 (2017) 75.
3. Duan X et al., "Two-dimensional transition metal dichalcogenides as atomically thin semiconductors: opportunities and challenges", *Chem. Soc. Rev* 44, 8859 (2015).
4. Lopez Sanchez O et al., "Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS_2 ", *Nat. Nanotechnol* 8, 497–501(2013).
5. Baugher B W et al., "Intrinsic electronic transport properties of high-quality monolayer and bilayer MoS_2 ", *Nano letters* 13, 4212-4216 (2013).
6. Lee, P.A.: *Physics and chemistry of materials with layered structures: optical and electrical properties.* Reidel, Dordrecht (1976).
7. Arney, J. S.; Chauvin, J.; Nauman, J.; Anderson, P.G. Kubelka-Munk Theory and MTF of Paper.// *J. Imagin Sci. Technol.*, 47 (2003), 339-345.

Теоретические аспекты роста многокомпонентных кристаллических тонкопленочных покрытий из газовой фазы

А.В. Редьков, С.А. Кукушкин

*Санкт-Петербург, Институт Проблем Машиностроения РАН, Большой пр. В.О. 61, 199178,
e-mail:avredkov@gmail.com*

В работе предложены теоретические модели для описания роста кристаллических тонких плёнок многокомпонентных соединений из газовой фазы по механизмам Бартона-Кабреры-Франка и Чернова. Получены аналитические выражения для нахождения зависимости скорости роста таких плёнок от условий роста, парциальных давлений различных компонентов и температуры. Полученные результаты могут быть использованы для оценки скорости роста различных многокомпонентных кристаллов и тонких плёнок без проведения натурных экспериментов.

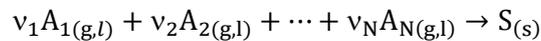
Theoretical aspects of the growth of multi-component crystalline thin-film coatings from the gas phase. A.V. Redkov, S.A. Kukushkin. Theoretical models for describing the growth of crystalline thin films of multi-component compounds from the gas phase by the mechanisms of Barton-Cabrera-Frank and Chernov are proposed. Analytical expressions are obtained for the dependence of the growth rate of such films on the growth conditions, partial pressures of various components, and temperature. The obtained results can be used to estimate the growth rate of various multi-component crystals and thin films without conducting real experiments.

Значительное число промышленных методов выращивания кристаллов заключаются в осаждении вещества на кристаллическую подложку из газовой фазы: хлорид-гидридная эпитаксия, металлоорганическая эпитаксия, молекулярно-пучковая эпитаксия и другие. В

настоящее с использованием этих методов выращиваются тонкие пленки сложных кристаллических соединений, содержащих в своем составе несколько различных типов атомов, например, GaN, ZnO, AlN, SiC. В большинстве случаев для таких материалов оптимальный режим роста (соотношение компонентов, температура, давления и т.д.) подбирается опытным путем, либо путем численного моделирования. Это вызвано тем, что основная доля теоретических исследований по росту кристаллов посвящена, в основном, однокомпонентным системам и, насколько мы знаем, нет обобщения этой теории, которое бы позволило полностью описать рост произвольного многокомпонентного кристалла из многокомпонентных сред по различным ростовым механизмам.

Отметим, что одним из механизмов, играющих ключевую роль при росте кристалла при малом пересыщении, является механизм терраса-ступень-излом, при котором атомы, адсорбированные на поверхности, диффундируют по террасам к ступеням и изломам, а затем встраиваются в кристаллическую решетку. Этот механизм был описан в классической работе Бартон, Кабреры и Франка (BCF) и в многочисленных обзорах и книгах [1-3]. Теория позволила предсказать зависимость скорости роста кристалла от условий роста и объяснить, почему кристаллы растут даже при очень низких пересыщениях (<1%), когда зарождение nanoостровков на поверхности невозможно. Чуть позже А. Чернов предложил подобный, но несколько иной механизм роста, который может иметь место в определенных условиях, например, когда поверхностная диффузия неэффективна. Основная идея А.Чернова заключалась в том, что компоненты диффундируют в газовой фазе в направлении ступеней и изломов и встраиваются непосредственно в них. В работе [4] Чернов разработал теорию, которая описала именно этот механизм, и позволила найти скорость роста однокомпонентного кристалла. Данная работа направлена на обобщение теорий Чернова и БКФ на многокомпонентные системы и в ней рассматривается рост многокомпонентного кристалла за счет диффузии компонентов из газа к поверхности кристалла.

Рассмотрим многокомпонентный кристалл, растущий из паров собственных компонентов. В общем случае реакцию можно записать так:



где $A_{i(g,l)}$ – отдельные компоненты в газовой фазе, $S_{(s)}$ - кристаллическая фаза; v_i стехиометрические коэффициенты. В результате этой реакции $S_{(s)}$ атомы отдельных компонентов доставляются к ступеням на поверхности кристалла и вызывают их «движение» по поверхности. Предполагаем, что реакция образования твердой фазы происходит непосредственно на поверхности у ступени, и не происходит в газовой фазе, что справедливо для многих ростовых процессов. Рассмотрим ряд параллельных ступеней на поверхности кристалла, и выберем систему координат так, что одна из ступеней совпадает с осью x , а ось z перпендикулярна поверхности кристалла. Для нахождения распределения каждого из N компонентов C_i около ступени в случае, если диффузия к ступени происходит в газовой фазе (механизм Чернова), необходимо решить уравнение [4]

$$\Delta C_i = 0$$

с учетом граничных условий и периодичности вдоль осей:

$$C_i|_{z=d} = C_{i\infty}$$

$$-D_i \frac{dC_i}{dz} = \beta_i V_i (C_i - C_{i0}) \Big|_{z=a/\pi}$$

где D_i – коэффициент диффузии, β_i – удельная скорость встраивания, V_i – объем i -го компонента, x_0 - расстояние между ступенями [4], а d - толщина пограничного слоя, в котором имеет место диффузия компонентов, C_{i0} - это равновесная концентрация i -го компонента, $C_{i\infty}$ - его истинная концентрация на внешней границе пограничного слоя. Найдя решение для концентраций C_i мы можем определить потоки вещества к ступеням. Учитывая, что они

стехиометрические (это можно сделать методом, предложенным в [5]) и опуская промежуточные выкладки, получим формулу для скорости перемещения группы эквидистантных ступеней ϑ_{∞} :

$$\vartheta_{\infty} = \frac{D^{os} \beta^{os}}{\beta^{os} a \ln \left(\frac{x_0}{a} \operatorname{sh} \frac{\pi d}{x_0} \right) + D^{os}} \xi V$$

где $D^{os} = \left(\sum_{i=1}^N \frac{v_i^2}{\pi D_i C_{i0}} \right)^{-1}$, $\beta^{os} = \left(\sum_{i=1}^N \frac{v_i^2}{\beta_i V_i C_{i0}} \right)^{-1}$, $\xi = \sum_{i=1}^N v_i \sigma_i$,

β^{os} - усредненный коэффициент встраивания, D^{os} – усредненный коэффициент диффузии, ξ - многокомпонентное пересыщение [5]. $\sigma_i = C_{i\infty}/C_{i0} - 1$. При применении этой формулы к однокомпонентной системе формула почти совпадает с формулой, полученной в [4]. Различие определяется тем, что в работе [4] встраивание в ступень происходило мгновенно ($\beta^{os} \rightarrow \infty$). Отметим, что именно скорость продвижения ступеней определяет нормальную скорость роста кристалла. Таким образом, уравнение для скорости продвижения группы ступеней и скорости роста кристалла в многокомпонентном случае такое же, как и для однокомпонентного кристалла, но в качестве коэффициентов диффузии и встраивания необходимо использовать усредненные величины, которые можно вычислить, зная индивидуальные свойства всех компонентов.

Работа выполнена с финансовой поддержкой Российского Научного Фонда (проект РНФ №19-72-00082).

Литература

1. Bennema, P. (1984). *Journal of Crystal Growth*, 69(1), 182-197.
2. Uwaha, M. (2016). *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 62(2), 58-68.
3. Chernov, A. A. (2012). *Modern crystallography III: crystal growth (Vol. 36)*. Springer Science & Business Media.
4. Chernov, A. A. (1961). *Sov. Phys. Usp*, 4, 129.
5. Kukushkin S. A., Slyozov V. V. (1996). *Disperse Systems on the Surface of Solids (Evolution Approach): Mechanisms of Thin Films Formation*. Nauka, St.-Petersburg.