

PACS numbers: 05.20.Dd, 05.50.+q, 61.46.Bc, 68.43.De, 68.43.Fg, 68.43.Jk

## **Примесные конфигурации на квадратной решётке**

А. С. Долгов

*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского  
«Харьковский авиационный институт»,  
ул. Чкалова, 17,  
61070 Харьков, Украина*

Рассматривается кинетика миграции взаимодействующих атомов моноатомного слоя. Вводятся соотношения, устанавливающие связи между вероятностями реализации всевозможных атомных конфигураций в пределах монослоя. В рамках допущения о макроскопической однородности заполнения слоя и термодинамическом равновесии записаны общие правила отыскания вероятностей возникновения тех или иных размещений на поверхности. В качестве специального варианта рассмотрен случай слабой корреляции в движении различных атомов. Изучены закономерности формирования сгустков, составленных из небольшого числа атомов. В случае притяжения между атомами при низком уровне средней плотности преобладают изолированные атомы, а при повышении степени заполнения они уступают место сгусткам, число которых при дальнейшем уплотнении начинает снижаться. Отдельно обсуждается вариант компактных образований из четырёх атомов. Выявлена тенденция к приоритетности наиболее плотного относительного размещения атомов в сгустке. Однако при повышенных уровнях средней плотности вытеснение компактных мелких сгустков более выражено, нежели вытянутых.

Розглядається кінетика міграції взаємодійних атомів моноатомового шару. Вводяться співвідношення, які встановлюють зв'язок між ймовірностями реалізації різноманітних атомарних конфігурацій у межах моношару. В рамках припущення про макроскопічну однорідність заповнення шару та термодинамічну рівновагу записано загальні правила віднаходження ймовірностей виникнення тих чи інших розміщень на поверхні. В якості спеціального варіанту розглянуто випадок слабкої кореляції в русі різних атомів. Вивчено закономірності формування згустків, складених з невеликого числа атомів. У випадку притягання між атомами при низькому рівні середньої густини переважають ізольовані атоми, а при підвищенні ступеня заповнення вони поступають-

ся місцем згусткам, число яких при подальшому ущільненні починає знижуватися. Окремо обговорюється варіант компактних утворень з чотирьох атомів. Виявлено тенденцію до пріоритетності найбільш щільного взаємного розміщення атомів у згустку. Однак при підвищених рівнях середньої густини витиснення компактних дрібних згустків більш виражене, ніж витягнутих.

The kinetics of the migration of interacting atoms of a monoatomic layer is considered. Relations establishing the relationships between the probabilities or all possible atomic configurations within the monolayer are introduced. Within the assumption of both the macroscopic homogeneity of filling the layer and the thermodynamic equilibrium, general rules for determining the probabilities of the occurrence of certain locations on the surface are written. As a special case, the weak correlation in the motion of various atoms is considered. The regularities of formation of bunches composed of a small number of atoms are studied. In the case of attraction between atoms at a low level of average density, isolated atoms predominate and, when the degree of filling increases, they give way towards bunches, whose number begins to decrease with further compaction. A variant of compact formations of four atoms is separately discussed. The tendency to prioritize the densest mutual arrangement of atoms in a bunch is revealed. However, at elevated levels of density, the displacement of compact small clumps is more pronounced than that of elongated ones.

**Ключевые слова:** монослой, кинетика, сгусток, вероятности конфигураций.

**Ключові слова:** моношар, кінетика, згусток, ймовірності конфігурацій.

**Key words:** monolayer, kinetics, bunch, configuration probabilities.

*(Получено 28 марта 2019 г.; после доработки — 9 апреля 2019 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из тенденций в изучении свойств поверхности является усиление интереса к микроскопическим характеристикам поверхностного моноатомного слоя.

Возникновение своеобразных поверхностных микроструктур из примесных и также, может быть, собственных атомов подложки отличает изучаемые объекты от неискажённых структур и, в частности, создаёт предпосылки селективного отклика на внешние воздействия, что, в свою очередь, влияет на общие свойства поверхности [1–3].

Опубликовано немало количество работ, где названные обстоятельства являются либо объектом основного внимания исследователей, либо определённым аспектом близкой проблемы (напри-

мер, [4–8]).

В настоящей работе в рамках некоторой упрощённой схемы ищутся вероятности реализации различных микроскопических конфигураций, возникающих в поверхностном слое.

## 2. СХЕМА АНАЛИЗА

Полагаем, что поверхность объёмной структуры, играющая роль матрицы для осаждения моноатомного примесного покрытия, создаёт квадратную сетку размещения осаждающихся атомов.

Имеется несколько вариантов равновесного размещения осаждённых атомов относительно узлов матрицы (позиций), однако для квадратной решётки каждый из этих физически неидентичных вариантов также представляют собой квадратную сетку, что даёт возможность в рамках предлагаемого исследования оставить указанную вариантность без обсуждения. Набор вариантов заполнения возможных позиций неограничен, однако повторяемость тех или иных конфигураций связана с общим количеством атомов примеси (средней плотностью) и существенно зависит от особенностей взаимодействия этих атомов между собой.

Таким образом, общая картина заполнения позиций и соответствующие характеристики поверхности задаются набором вероятностей возникновения различных примесных конфигураций, что, в свою очередь, в качестве одной из задач изучения свойств объекта определяет необходимость отыскания этих вероятностей.

Взаимодействие между атомами определяет поправку к величине потенциального барьера, преодоление которого необходимо для перескока, в силу чего вероятности перескоков для атомов, оказавшихся в ближайшем соседстве, отличаются от аналогичных характеристик изолированных атомов.

Кроме того, общей особенностью структуры может считаться несовпадение равновесного удаления между обсуждаемыми атомами с соответствующим параметром матрицы. Это обстоятельство проявляется как дополнительное притяжение, либо как отталкивание для атомов в соседствующих позициях.

Короткодействие позволяет учесть названный фактор введением соответствующего повышающего либо понижающего множителя для вероятностей перескоков за единицу времени, который далее обозначается символом  $\nu$ .

Исходными уравнениями являются соотношения баланса для микроскопических конфигураций всевозможных видов.

Предположение о макроскопической однородности размещений на поверхности исключает макрокоординатные зависимости, сохраняя, разумеется, необходимость соответствий между микроскопическими размещениями.

### 3. ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Уравнение для величины  $\varphi(11)$ , — вероятности реализации конфигурации из двух соседних заполненных позиций, — таково:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\omega_0} \frac{d\varphi(11)}{dt} = & 2\nu^3\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 \end{pmatrix} + 2\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \\
 & + 4\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + 4\nu\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 2\nu\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \\
 & + 2\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 4\nu^3\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 4\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \\
 & + 4\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 4\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 4\nu\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \\
 & + 4\nu\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 4\nu\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 4\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \\
 & - 2\nu^3\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 \end{pmatrix} - 4\nu^3\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 \end{pmatrix} - 8\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \\
 & - 4\nu^2\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} - 6\nu\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{1}
 \end{aligned}$$

Здесь  $\varphi$  — обозначение вероятности конфигурации, представленной как аргумент («1» — заполненный узел, «0» — пустой). Каждое из слагаемых (1) представляет некоторый вариант перескоков, ведущих к изменению  $\varphi(11)$ . Степень  $\nu$  перед каждым из  $\varphi$  совпадает с количеством заполненных позиций в ближайшем соседстве, что учитывает смысл  $\nu$  как дополнительного множителя, имеющего вид фактора Гиббса. Численные коэффициенты задаются статистическим весом набора конфигураций, совпадающих с представленной формой и (или) физически идентичных.

Параметр  $\omega_0$  — вероятность перескока за единицу времени для изолированного атома; величина  $\omega_0 \nu^p$  — аналогичная удельная вероятность в присутствии  $p$  атомов в ближайшем соседстве.

Уравнение (1) незамкнуто, т.е. включает в себя в качестве неизвестных величин вероятности образований, различающихся как количеством охватываемых узлов, так и характером заполнения этих позиций. Обращение к уравнениям для многоузельных конфигураций вводит в рассмотрение вероятности ещё более громоздких размещений, в силу чего желаемая замкнутость системы уравнений для  $\varphi$  не может быть достигнута. Требуются дополнительные соответствия между функциями  $\varphi$  различающихся аргументов.

Функции  $\varphi$  связаны рядом условий, определяемых физическим содержанием этих величин. Если  $\varphi(M, k)$  — вероятность конфигурации, включающей некоторый массив заполненных и незаполненных узлов, плюс дополнительный узел с уровнем заполнения « $k$ » ( $k = 0, 1$ ), то

$$\varphi(M, 1) + \varphi(M, 0) \equiv \varphi(M). \quad (2)$$

Кроме того, для конфигураций, сводимых к виду линейной последовательности более простых размещений, имеются соответствия вида:

$$\varphi(M) = \frac{\varphi(M_1)\varphi(M_2)}{\varphi(M_{12})}, \quad (3)$$

где массив  $M$  составлен из массивов  $M_1$  и  $M_2$  с перекрытием в диапазоне массива  $M_{12}$ .

Правила (2), (3) позволяют переписать уравнение (1) в форме, где присутствуют вероятности относительно низких порядков (не выше четырёх). Соответствующие выкладки для равновесных распределений охватывают требования детального равновесия для всевозможных конфигураций и приводят к соотношениям:

$$\varphi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2(1-\nu)} \times \left\{ \frac{\varphi^2(10)[\nu\varphi(1) + (1-\nu)\varphi(10)]}{\varphi(1)(1-\varphi(1))} + 2 \frac{\varphi^2(10)}{1-\varphi(1)} - 3\nu \frac{[\varphi(1) - \varphi(10)]\varphi(10)}{\varphi(1)} \right\}, \quad (4)$$

где  $\varphi(1)$  — средний уровень заполнения позиций.

#### 4. СЛАБОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Соотношение (4) — точное. Возможности его использования

ограничены отсутствием дополнительного явного соответствия между вероятностью элементарного плоскостного образования  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$  и различными вероятностями второго порядка. Однако в

варианте  $\nu = 1$  (кинематическое взаимодействие, отсутствие влияния близкого соседства на вероятности перескоков) равенство (4) требует обращения в нуль выражения в фигурных скобках (4), и получается:

$$\varphi(10) = \varphi(1)(1 - j(1)), \quad \varphi(11) = \varphi^2(1), \quad \varphi(111) = \varphi^3(1) \quad (5)$$

и т.д.

Ясно, что записанные выражения отражают картину независимого распределения частиц. При этом вероятность произвольной конфигурации зависит только от количества частиц, но не от их взаимного размещения.

Таким образом, при этом

$$\varphi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \varphi(1101) = \varphi^3(1)(1 - \varphi(1)). \quad (6)$$

Равенство (4) позволяет приближённо найти вероятности интересующих конфигураций в случае малого отличия  $\nu$  от единицы, что означает слабое влияние близкого соседства на вероятности перескоков.

Стоит обратить внимание на то, что смысл параметра  $\nu$  предопределяет форму

$$\nu = \exp\left(\frac{V}{k_B T}\right),$$

где  $V$  — энергия взаимодействия; эта величина независимо от знака  $V$  приближается к единице при достаточно высоких температурах.

Таким образом, «слабое» взаимодействие может также квалифицироваться как высокотемпературное.

Рассматривая выражения (5), (6) как нулевое приближение и используя уравнение (4), нетрудно найти линейные по  $(1 - \nu)$  поправки к интересующим двухузельным вероятностям. Получаем

$$\varphi(11) = \varphi^2(1) + (1 - \nu)\varphi^2(1)[1 - \varphi(1)]^2. \quad (7)$$

Выражение (7) демонстрирует ожидаемое возрастание вероятности непосредственного соседства для значений  $V$ , уступающих

единице, и убывание в противоположном случае. Качественное отличие второго слагаемого (7) от нулевого приближения — в наличии множителя  $\varphi^2(0)$ . Видим, что роль добавки наиболее существенна при низких общих плотностях поверхностного покрытия, а если величина  $\varphi(1)$  приближается к физическому пределу — единице, то изменение сгущения становится практически невозможным.

### 5. ОГРАНИЧЕННЫЕ ДВУМЕРНЫЕ ОБРАЗОВАНИЯ

Соотношение (4) представляет взаимообусловленность моноатомных цепочечных структур  $(\varphi(11), \varphi(10), \varphi(111), \dots)$  и вероятностей плоскостных образований  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ , ... в терминах вероятностей образований. Определённые замечания могут быть сделаны на основе самого факта присутствия величины  $\varphi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$  в равенстве (4) (предшествующий пункт), однако это соотношение незамкнуто и в общем случае не позволяет найти законченные выражения для искомых вероятностей.

Ситуация аналогична той, что имеет место для цепочки уравнений Боголюбова [9]. Как известно, разрешением проблемы незамкнутости является процедура «расщепления», определяемая аппроксимацией высших функций распределения комбинацией (произведением) функций низших порядков.

Правомерность аппроксимации определяется интуитивно несомненным допущением, что роль тонких деталей общей картины, связанных с функциями распределения высоких порядков, для практически наиболее важных функций нижних порядков не является главенствующей. Это позволяет учитывать функции высоких порядков усреднённо или путём иных сходных огрублений.

Целесообразно обратиться к уравнениям, определяющим кинетику формирования — разрушения наименьших плоскостных конфигураций. Удобно сосредоточить внимание на конфигурации  $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ .

Возникновение, либо исчезновение четырёхатомного плотного образования при занятых позициях  $\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$  определяется заполнением, либо опустошением четвёртого из углов. Кинетика этих событий представляется соотношением

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{d}{dt} \varphi \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = 2\nu^{3\varphi} \varphi \begin{pmatrix} \bullet & & \\ \bullet & 1 & \bullet \\ 1 & 0 & \\ 1 & 1 & \end{pmatrix} - 2\nu^{2+\varphi} \varphi \begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 1 & \bullet \\ 1 & 1 & \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где точками обозначены позиции, заполнение которых влияет на вероятность перескока и может варьироваться. В строгом подходе каждое из выражений (8) должно бы, подобно тому как в уравнении (1), представляться несколькими слагаемыми, что возвращало бы нас к проблеме незамкнутости. Форма (8) предполагает аппроксимацию, состоящую в замене чисел заполнения в позициях, обозначенных точками, средними значениями чисел заполнения позиций структуры. При этом коэффициент взаимодействия  $\nu$  также присутствует в нецелой степени, соответствующей среднему уровню заполнения примыкающих позиций ( $\varphi \equiv \varphi(\mathbf{1})$ ). Вводимая аппроксимация корреспондирует с идеей расщепления последовательности уравнений, имея, разумеется, некоторую специфику, диктуемую свойствами объекта.

Используя соответствия вида (2), (3), из равенства (8) для равновесного состояния находим

$$\varphi \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\varphi^2(\mathbf{11})}{\lambda + (1-\lambda)\varphi}, \quad (9)$$

$$\varphi \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\lambda(1-\varphi)}{\varphi^2 + \lambda\varphi(1-\varphi)} \varphi^2(\mathbf{11}), \quad (10)$$

$$\varphi \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \varphi(\mathbf{11}) \left\{ 1 - \frac{\varphi + 2\lambda(1-\varphi)}{\varphi[\lambda + (1-\lambda)\varphi]} \varphi(\mathbf{11}) \right\}, \quad (11)$$

$$\lambda = \nu^{2(1-\varphi)}. \quad (12)$$

Легко видеть, что в случае  $\nu = 1$  («кинематическое» взаимодействие) выражения (9), (11) не отличаются от того, что представлено формулами (5), (6). То же самое следует сказать о случае достаточно плотного заполнения ( $\varphi \rightarrow 1$ ).

Параметр  $\lambda$  (12) для двумерной структуры играет роль, сходную с той, что принадлежит величине  $\nu$  в одномерной цепи (особенно в асимптотических вариантах). При уровне заполнения  $\varphi = 1/2$  эти две величины совпадают. С уменьшением  $\varphi$  различие между  $\lambda$  и  $\nu$  увеличивается. Это значит, что область низких средних плотностей — это зона обострения тех тенденций в структуре размещения, что проявляются и в одномерной цепи. Увеличение  $\varphi$  сверх уровня  $1/2$  соответствует приближению  $\lambda$  к единице, что следует расценить как

эффект подавления вклада межатомного взаимодействия, определяемый, по-видимому, увеличением количества ориентаций воздействия.

Подстановка выражения (10) в уравнение (4) приводит его к виду

$$(1 - \nu)\varphi^3(10) + (3\nu + 2(1 - \nu)\varphi - B)\varphi^2(10) - (3\nu\varphi(1 - \varphi) - 2\varphi B)\varphi(10) - B\varphi^2 = 0, \quad (13)$$

$$B \equiv 2(1 - \nu) \frac{\lambda(1 - \varphi)^2}{\varphi + \lambda(1 - \varphi)}. \quad (14)$$

Соотношение (13) вместе с обозначением (14) является алгебраическим уравнением третьей степени для величины  $\varphi(10)$ , определяя её как функцию среднего уровня заполнения структуры. Отыскание  $\varphi(10)$  позволяет по нормировочным соответствиям (2) найти и другие вероятности второго порядка, а также вероятности мельчайших плоскостных конфигураций (9)–(11) и с использованием правил (3) сконструировать выражения для вероятностей разнообразных конфигураций сколь угодно высоких порядков. Следует обратиться к специальным вариантам (13), (14).

## 6. СИЛЬНОЕ ПРИТЯЖЕНИЕ

Термины «сильное» или «слабое» взаимодействие в данной работе понимаются как относительная характеристика — оценка масштаба изменения наблюдаемой вероятности перескока в результате близкого соседства субъектов миграции. Таким образом, название данного пункта охватывает условия, когда  $\nu \ll 1$ , что может иметь место как при немалых абсолютных значениях энергии взаимодействия, так и при достаточно слабом взаимодействии в области низких температур.

Свойства обсуждаемой структуры определяются уровнем заполнения  $\varphi$ . Если  $\nu \ll 1$ ,  $\varphi \ll 1$ , то уравнение (12) с учётом (13) приобретает вид

$$\varphi^3(10) + \left(2\varphi + 3\nu - 2\frac{\nu^2}{\varphi}\right)\varphi^2(10) - (3\nu\varphi - 4\nu^2)\varphi(10) - 2\nu^2\varphi = 0. \quad (15)$$

Главные свойства уравнения (15) зависят также и от соотношения величин  $\nu$ ,  $\varphi$ . Если  $\varphi \ll \nu^2$  (весьма низкая плотность), то при сохранении главных слагаемых уравнение (15) переписывается как

$$-\nu^2\varphi^2(10) + 2\nu^2\varphi\varphi(10) - \nu^2\varphi^2 = 0,$$

т.е. оказывается, что

$$\varphi(10) \approx \varphi.$$

Таким образом, картина покрытия представлена набором редких изолированных атомов. Эффект притяжения, определяемый величиной  $\nu$ , в довольно широкой области изменения этой величины, практически не сказывается на общей картине распределения.

Если же  $\nu \ll \varphi$  при сохранении малости последней величины, то иерархия слагаемых уравнения (15) претерпевает существенные изменения, и получается:

$$\varphi^3(10) + 2\varphi\varphi^2(10) - 3\nu\varphi\varphi(10) - 2\nu^2\varphi = 0,$$

откуда

$$\varphi(10) \approx \frac{3}{2}\nu, \quad (16)$$

что много меньше  $\varphi$ . Это означает, что в оговорённых условиях присутствие атома в какой-либо из возможных позиций не сопровождается, как правило, соседством с пустым узлом. Иными словами, распределение представлено преимущественно относительно крупными сгустками атомов, разделёнными ещё более значительными участками, свободными от покрытия. Отсутствие зависимости (16) от  $\varphi$  свидетельствует о сохранении названной структуры покрытия при широком варьировании  $\varphi$  в пределах оговорённых выше ограничений.

Характерный размер (радиус) сгустка, измеренный в количестве разрешённых позиций, оценивается величиной

$$\frac{4}{3}\frac{\varphi}{\nu},$$

а количество сгустков пропорционально  $\nu^2/\varphi$ .

Таким образом, при увеличении общего уровня заполнения размеры сгустков растут, а их количество уменьшается (происходит слияние сгустков).

В силу кардинального различия структуры заполнения поверхности в альтернативных вариантах  $\nu \gg \varphi$ ,  $\varphi \gg \nu$ , целесообразно обратить внимание на довольно специальный, но вполне реализуемый вариант  $\nu \approx \varphi$ . Получается:  $\varphi(10) \approx \alpha\varphi$ , где  $\alpha$  — около 1/2. Это значит, что условие  $\varphi = \nu$  — приблизительно фиксирует пограничный режим, характеризующийся начальными признаками консолидации атомов на поверхности, когда количества изолированных и объединившихся в пары атомов сопоставимо.

При этом более сложных образований практически нет.

В ситуации высокой степени покрытия ( $\varphi \rightarrow 1$ ) среди слагаемых уравнения (13) главенствуют члены второго и нулевого порядка  $\varphi(10)$ , что даёт

$$\varphi(10) \approx 1 - \varphi, \quad \varphi(11) \approx 2\varphi - 1, \quad (17)$$

а величина  $\varphi(00)$  с точностью используемых аппроксимаций не отличается от нуля. Тем самым обнаруживается, что при высоких плотностях появление лакун, охватывающих несколько позиций, почти исключено. Преобладают изолированные вакансии.

При промежуточных уровнях плотности ( $\varphi \cong 1/2$ ) наименьшим оказывается кубичное слагаемое уравнения (14). Остальные определяют выражение

$$\varphi(10) \approx v^{1-\varphi}(1 - \varphi). \quad (18)$$

Согласно (18) снижение  $v$ , происходящее, например, при понижении температуры, ведёт и к уменьшению величины  $\varphi(10)$ . Это может происходить только в результате формирования сгустков увеличенных размеров, где отношение числа «краевых» атомов к числу «глубинных» уменьшается. Названная тенденция наиболее отчетливо выражена при относительно низких общих уровнях плотности.

## 7. СПЕЦИАЛЬНЫЕ КОНФИГУРАЦИИ

Реализация простейших форм размещений атомов на поверхности предопределяет возможности возникновения более сложных образований, что в соответствии с логикой выполняемых построений устанавливает зависимость вероятностей усложнённых конфигураций от вероятностей более простых. При этом вероятность появления той или иной конфигурации зависит как от числа атомов, представляющих данное размещение, так и от формы соответствующего образования. В качестве иллюстрации представим эти обстоятельства для разных вариантов изолированных четырёхатомных образований. Сравним наиболее плотное и наиболее развёрнутое четырёхатомные образования, отвечающие размещениям

$$\begin{array}{cccc} & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ & 0 & 0 & \end{array} \quad \text{и} \quad \begin{array}{cccc} & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ & & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

Вероятности появления объединений из четырёх атомов, не контактирующих с какими-либо иными атомами, в соответствии с правилами (2), (3), представляются выражениями

$$\frac{\varphi^4 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \varphi \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{\varphi^4(11)}, \quad \frac{\varphi^6 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{\varphi^3(11)\varphi^2(10)}$$

соответственно. Таким образом, соотношение этих величин  $\theta$  есть

$$\theta = \frac{\varphi \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \varphi^2(10)}{\varphi^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \varphi(11)}. \quad (19)$$

Если  $\nu = 1$ , то выражение (19) приобретает вид

$$\theta = \frac{1}{(1 - \varphi)^2}, \quad (20)$$

свидетельствующей о преобладании компактных сгустков над развёрнутыми того же физического объёма. При низких плотностях ( $\varphi \ll 1$ ) это различие выражено слабо, но, если  $\varphi \rightarrow 1$ , то вероятности двух обсуждаемых вариантов размещения несопоставимы. Причины этого обстоятельства преимущественно геометрического характера: реализация четырёхатомного изолированного квадрата требует 8 дополнительных пустых узлов, в то время как четырёхатомная цепочка — 10. Напомним, что речь идёт о случае чисто кинематического взаимодействия.

В условиях  $\nu \ll 1$  иерархия статистических предпочтений иная. Для крайне низких уровней плотности  $\varphi \ll \nu$  формально вычисленное значение  $\theta$  едва ли представляет интерес, так как всякие сгустки, даже ещё более мелкие, при этом, как отмечалось выше, встречаются крайне редко. При повышенных уровнях  $\varphi$  ( $\varphi \gg \nu$ ) при обеспечении невысокой средней плотности использование выражений (9), (11), (12), (19) определяет приближенные значения

$$\theta \approx 1 - \frac{3\nu}{2\varphi}.$$

Это значит, что варианты сжатой и развёрнутой конфигураций почти равноправны с некоторым, впрочем, довольно слабым предпочтением «цепочек» сравнительно с «квадратами». Увеличение плотности в этих условиях практически устраняет этот дисбаланс. Однако, если средний уровень заполнения превосхо-

дит  $1/2$  и приближается к единице, возникают новые тенденции. Определяющее соотношение (19) с учётом формул (9), (11), (12), (17) при этом даёт

$$\theta \rightarrow \frac{1}{4} \frac{1}{(1-\varphi)^2}. \quad (21)$$

Выражение (21) отличается от (20) только множителем  $1/4$ . Оба соотношения (20), (21) фиксируют тенденцию к подавлению возникновения конфигураций, предполагающих увеличенные участки поверхности в расчёте на один атом покрывающей компоненты, но при наличии сильного притяжения эта тенденция несколько ослаблена. Это обстоятельство выглядит неожиданным. Следует полагать, что в условиях достаточно плотного заполнения позиций структуры схватывание между субъектами миграции предопределяет предпочтительность достаточно крупных сгустков, вследствие чего статистическая значимость форм относительно небольших образований оказывается ослабленной.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненные разработки выявляют возможности и условия возникновения микроструктур на поверхности матрицы, которые могут также трактоваться как устойчивые формы корреляции в размещении примесных атомов на поверхности макроскопически однородной квадратной решётки. Рельеф потенциала, формируемый набором конфигураций на поверхности, определяет количественные и, может быть, также качественные свойства поверхности, такие как эмиссионная способность, аккомодация энергии, механизм взаимодействия медленных атомов с поверхностью, диффузионный перенос и др.

Параметры взаимодействия между атомами примесного слоя, обозначенные выше как  $\nu$ ,  $\lambda$  температурообусловлены и широко варьируются при изменении температуры, что не связано с аппроксимационным характером их введения и возможными количественными ограничениями. Температурная зависимость определяет эволюции поверхностных микрораспределений при варьировании температуры и определяет значительные ресурсы направленного изменения характеристик поверхности путём выбора или изменения температурного режима.

Логика выполняемого анализа указывает, что преобладающая часть установленных тенденций, предпочтений в отношении вероятностей мельчайших (в частности, четырёхузельных) конфигураций может быть распространена и на более крупные или даже макроскопические образования на поверхности.

Методические приёмы данной работы, может быть, при некоторой их модификации, допускают применение к изучению свойств ряда иных структур, сходных с представленными здесь.

### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Э. Зенгуил, *Физика поверхности* (Москва: Мир: 1990) (пер. с англ.).
2. В. Г. Лифшиц, *Соросовский образовательный журнал*, **1**: 99 (1995).
3. С. А. Кукушкин, А. В. Осипов, *УФН*, **168**, № 10: 1083 (1998).
4. С. И. Садовников, А. А. Ремпель, *ФТТ*, **49**, № 8: 1470 (2007).
5. С. И. Сидоренко, Ю. М. Макогон, С. М. Волошко, *Материалознавство тонкоплівкових наноструктур* (Київ: Наукова думка: 2000), с. 216.
6. V. G. Kotlyar, A. V. Zotov, A. A. Saranin, T. S. Kasyanova, M. A. Cherevik, I. V. Pisarenko, and V. G. Lifshits, *Phys. Rev. B*, **66**: 165401 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.165401>.
7. А. С. Долгов, А. В. Валуйская, *ФИП*, **10**, № 4: 308 (2012).
8. Р. М. Пелещак, О.В. Кузык, О.О. Даньків, *Журнал фізичних досліджень*, **17**, № 2: 2601 (2013).
9. Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике* (Москва–Ленинград: ОГИЗ: 1946).

### REFERENCES

1. A. Zangwill, *Fizika Poverkhnosti* [Physics at Surfaces] (Moscow: Mir: 1990) (Russian translation).
2. V. G. Lifshits, *Sorosovskiy Obrazovatel'nyy Zhurnal*, **1**: 99 (1995) (in Russian).
3. S. A. Kukushkin and A. V. Osipov, *Uspekhi Fiz. Nauk*, **168**, No. 10: 1083 (1998) (in Russian).
4. S. I. Sadovnikov and A. A. Rempel', *Fiz. Tverd. Tela*, **49**, No. 8: 1470 (2007) (in Russian).
5. S. I. Sidorenko, Yu. M. Makogon, and S. M. Voloshko, *Materialoznavstvo Tonkoplivkovykh Nanostruktur* (Kyiv: Naukova Dumka: 2000), p. 216 (in Ukrainian).
6. V. G. Kotlyar, A. V. Zotov, A. A. Saranin, T. S. Kasyanova, M. A. Cherevik, I. V. Pisarenko, and V. G. Lifshits, *Phys. Rev. B*, **66**: 165401 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.165401>.
7. A. S. Dolgov and A. V. Valuyskaya, *FIP*, **10**, No. 4: 308 (2012) (in Russian).
8. R. M. Peleshchak, O. V. Kuzyk, and O. O. Dankiv, *Zhurnal Fizychnykh Doslidzhen'*, **17**, No. 2: 2601 (2013) (in Ukrainian).
9. N. N. Bogolyubov, *Problemy Dinamicheskoy Teorii v Statisticheskoy Fizike* (Moscow–Leningrad: OGIZ: 1946) (in Russian).

National Aerospace University 'Kharkiv Aviation Institute',  
17, Chkalov Str.,  
UA-61070 Kharkiv, Ukraine