

doi: 10.17586/2226-1494-2021-21-5-686-693

УДК 539.211, 538.971

## Аномальный диффузионный профиль адатомов на экстремально широких террасах поверхности Si(111)

Евгения Олеговна Соловьева<sup>1</sup>✉, Дмитрий Игоревич Роголо<sup>2</sup>,  
 Дмитрий Владимирович Щеглов<sup>3</sup>, Александр Васильевич Латышев<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup> Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, 630090, Российская Федерация

<sup>1</sup> eugeniasoloveva11@gmail.com✉, <https://orcid.org/0000-0002-6822-5279>

<sup>2</sup> rogilod@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7586-0107>

<sup>3</sup> sheglov@isp.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5220-8781>

<sup>4</sup> latyshev@isp.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4016-593X>

### Аннотация

**Предмет исследования.** В работе экспериментально изучено распределение концентрации адатомов на экстремально широких террасах поверхности Si(111), сопоставимых по размерам с длиной диффузии адатомов. **Метод.** Экстремально широкие террасы созданы в процессе *in situ* экспериментов, проводимых методом сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии в условиях высокотемпературного отжига образцов Si(111) (более 1000 °С) с быстрым охлаждением до 750 °С для формирования доменов сверхструктуры  $7 \times 7$ . Детальный анализ морфологии поверхности террас выполнен методом *ex situ* атомно-силовой микроскопии в атмосферных условиях. **Основные результаты.** На основе изображений, полученных с помощью атомно-силового микроскопа, с высоким разрешением (1,2 нм/пиксел) сформированы панорамные топографические изображения террас. С использованием цифровой обработки панорамных изображений, экспериментально визуализировано распределение концентрации адатомов  $n$ . Для террасы, охлажденной от 1070 °С, в центре террасы  $n$  принимает минимальные значения около 0,13 БС (1 бислой (БС) =  $1,56 \times 10^{15}$  см<sup>-2</sup>), а вблизи ступени, ограничивающей террасу — возрастает до 0,14 БС. Такое радиальное распределение  $n(r)$  при 1070 °С соответствует коэффициенту диффузии адатомов  $D = 59 \pm 12$  мкм<sup>2</sup>/с. Обнаружено, что для террасы, охлажденной от 1090 °С, подход, который предполагает одинаковую длину диффузии адатомов по всей террасе, не описывает экспериментальное распределение  $n(r)$ . Для его анализа использовано решение стационарного уравнения диффузии в предположении, что  $D$  не является константой. На основе численного решения получена зависимость  $D$  от экспериментально измеренных значений  $n$ . При 1090 °С в предположении, что время жизни адатомов не зависит от  $n$ , получено, что коэффициент диффузии адатомов уменьшается от 140 мкм<sup>2</sup>/с при  $n = 0,093$  БС (в центральных областях террасы) до 5 мкм<sup>2</sup>/с при  $n = 0,118$  БС (возле ступени). **Практическая значимость.** Результаты работы экспериментально демонстрируют, что управление концентрацией адатомов может быть использовано для существенного изменения диффузионных свойств адсорбционного слоя на поверхности кристалла.

### Ключевые слова

кремний, поверхностная диффузия, адатом, атомно-силовая микроскопия, распределение концентрации

### Благодарности

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2020-797).

**Ссылка для цитирования:** Соловьева Е.О., Роголо Д.И., Щеглов Д.В., Латышев А.В. Аномальный диффузионный профиль адатомов на экстремально широких террасах поверхности Si(111) // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21, № 5. С. 686–693. doi: 10.17586/2226-1494-2021-21-5-686-693

## Abnormal diffusion profile of adatoms on extremely wide terraces of the Si(111) surface

Evgeniia O. Soloveva<sup>1✉</sup>, Dmitry I. Rogilo<sup>2</sup>, Dmitry V. Sheglov<sup>3</sup>, Alexander V. Latyshev<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup> Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russian Federation

<sup>1</sup> eugeniasoloveva11@gmail.com✉, <https://orcid.org/0000-0002-6822-5279>

<sup>2</sup> rogilod@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7586-0107>

<sup>3</sup> sheglov@isp.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5220-8781>

<sup>4</sup> latyshev@isp.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4016-593X>

### Abstract

The authors experimentally studied the distribution of the adatom concentration on extremely wide terraces of the Si(111) surface whose dimensions are comparable with the diffusion length of adatoms. The extremely wide terraces were created during *in situ* experiments carried out by ultrahigh vacuum reflection electron microscopy by high-temperature annealing of Si(111) samples (more than 1000 °C) followed by rapid cooling to 750 °C to form  $7 \times 7$  superstructure domains. A detailed analysis of the surface morphology of the terraces was carried out by *ex situ* atomic force microscopy under ambient conditions. Based on high-resolution (1.2 nm/pixel) atomic force microscopy images, panoramic topographic images of the terraces were formed. Digital processing of the panoramic images visualized the distribution of the adatom concentration  $n$ . For a terrace cooled from 1070 °C, central terrace regions show minimum  $n$  values around 0.13 BL (1 bilayer (BL) =  $1.56 \times 10^{15}$  cm<sup>-2</sup>); close to the monatomic step bordering the terrace,  $n$  increases to about 0.14 BL. The authors determined that this radial distribution  $n(r)$  at 1070 °C corresponds to the adatom diffusion coefficient  $D = 59 \pm 12$  μm<sup>2</sup>/s. It was found that, for a terrace cooled from 1090 °C, the approach assuming the same adatom diffusion length over the entire terrace does not describe the experimental  $n(r)$  distribution. For its analysis, the authors used the solution of the stationary diffusion equation under the assumption that  $D$  is not constant. Based on a numerical solution, the dependence of  $D$  on the experimentally measured  $n$  values was obtained. Under the assumption that adatom lifetime does not depend on  $n$  at 1090 °C, the adatom diffusion coefficient was found to decrease from 140 μm<sup>2</sup>/s at  $n = 0.093$  BL (in the central terrace regions) to 5 μm<sup>2</sup>/s at  $n = 0.118$  BL (near the step). The results of this work experimentally demonstrated that the control over adatom concentration can be used to significantly vary the diffusion properties of the adsorption layer on the crystal surface.

### Keywords

silicon, surface diffusion, adatom, atomic force microscopy, concentration distribution

### Acknowledgments

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (grant No. 075-15-2020-797).

**For citation:** Soloveva E.O., Rogilo D.I., Sheglov D.V., Latyshev A.V. Abnormal diffusion profile of adatoms on extremely wide terraces of the Si(111) surface. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2021, vol. 21, no. 5, pp. 686–693 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2021-21-5-686-693

### Введение

Изучение процессов сублимации, диффузии, встраивания и выхода адатомов из ступени на поверхности кристалла — важные темы фундаментальных исследований в области физики конденсированного состояния вещества. Эти основные процессы контролируют концентрацию адатомов на террасах и эволюцию морфологии поверхности кристалла [1, 2]. Главным является понимание основных механизмов диффузии адсорбированных атомов на поверхности кристалла при сублимации, адсорбции атомов и эпитаксиальном росте, так как процесс диффузии имеет большое практическое значение для современных полупроводниковых технологий [3, 4].

Поверхность Si(111), которая отжигалась при высоких температурах и затем охлаждалась до комнатной температуры, характеризуется наличием сверхструктуры  $7 \times 7$ . Реконструкция структуры  $7 \times 7$  поверхности кремния (Si) стабильна ниже 830 °C, при повышении температуры поверхность Si(111) испытывает фазовый переход первого рода в неупорядоченную структуру «1×1». Данный переход обратимый, охлаждение по-

верхности ниже 830 °C [5] приводит к восстановлению реконструкции  $7 \times 7$  [6]. В работе [7] показано, что элементарная ячейка неупорядоченной структуры «1×1» имеет более высокую атомную плотность, чем элементарная ячейка  $7 \times 7$ . Это приводит к образованию избыточных адатомов на поверхности, которые группируются в кластеры [8, 9], при процессе перехода от структуры «1×1» в реконструкцию  $7 \times 7$ . То, что верхний слой поверхности  $7 \times 7$  состоит из адатомов показано в работе Харрисона [10].

В работе [11] выполнен расчет распределения концентрации адатомов на основе экспериментальных данных о кинетике движения ступеней на поверхности Si(111). Изменения концентрации на террасе шириной порядка 1 мкм при температуре около 927 °C составляют порядка  $10^{-5}$  МС (монослой) (1 МС =  $7,8 \times 10^{14}$  см<sup>-2</sup>). Эти значения слишком малы, чтобы их зарегистрировать современными методами. Потому неравномерность распределения можно экспериментально измерить только на широких террасах, размер которых сопоставим с длиной диффузии адатомов. В работе [12] показано, что экспериментальное изучение распределения концентрации адатомов на

террасах в условиях сублимации можно использовать для исследования атомных процессов на поверхности кристаллов.

### Методика проведения эксперимента

Образцы размерами  $7 \times 1 \times 0,38$  мм, вырезанные из стандартной пластины Si(111) *n*-типа, имеют удельное сопротивление  $0,3 \text{ Ом}\cdot\text{см}$  и отклонение от кристаллографической грани порядка  $0,01^\circ$ . После химической очистки образцов петролейным эфиром, следуя методике, представленной в работе [13], методом травления пучком ионов аргона низкой энергии на поверхности образцов сформирована лунка. Каждый образец отжигался при температуре  $1300^\circ\text{C}$  в *in situ* сверхвысоковакуумном отражательном электронном микроскопе для получения атомно-чистой поверхности. Дальнейший отжиг при температурах  $1090^\circ\text{C}$  и  $1070^\circ\text{C}$  приводил к формированию экстремально широких террас диаметром  $52 \text{ мкм}$  и  $70 \text{ мкм}$  соответственно. Затем температура образцов быстро (более  $100^\circ\text{C}/\text{с}$ ) снижалась до  $750^\circ\text{C}$  для формирования доменов сверхструктуры  $7 \times 7$  на поверхности Si(111). После отжига при  $750^\circ\text{C}$  в течение  $10 \text{ с}$  нагрев отключался, и образцы вынимались из микроскопа.

Морфология поверхности образцов детально анализировалась методом *ex situ* атомно-силовой микроскопии в атмосферных условиях. В настоящей работе использован атомно-силовой микроскоп (АСМ) Bruker MultiMode 8 в полуконтактном режиме измерений. Осуществлено сканирование отдельных фрагментов каждой террасы с высоким разрешением ( $1,2 \text{ нм}/\text{пиксел}$ ) и размером изображения  $17 \times 9 \text{ мкм}$  (рис. 1, *a*). Каждое изображение обработано в программе Gwyddion для устранения дефектов, вносимых несовершенством системы сканирования АСМ. Отдельные изображения объединялись в панорамное изображение, приведенное

на рис. 1, *b*. Эксперименты выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования «Наноструктуры» (г. Новосибирск).

### Получение и обработка панорамного АСМ-изображения

На панорамном АСМ-изображении террасы Si(111) (рис. 1, *b*) видно, что между треугольными темными участками, соответствующими доменам сверхструктуры  $7 \times 7$ , есть светлые области, которые соответствуют большему значению высоты из-за более высокой поверхностной атомной плотности. Эти участки сформировались в процессе отжига образца при температуре  $750^\circ\text{C}$  из адатомов, диффундировавших на поверхности при высоких температурах (около  $1090^\circ\text{C}$ ).

В процессе сверхструктурного перехода первого рода адатомы на поверхности Si(111) перераспределяются, образуя области со структурами  $\langle 1 \times 1 \rangle$  и  $7 \times 7$ , которые имеют различную высоту на АСМ-изображении. Примем за ноль высоты уровень поверхности со структурой  $7 \times 7$  (темные участки с треугольной огранкой), на участках с высокой концентрацией адатомов преобладает доля структуры  $\langle 1 \times 1 \rangle$ , что соответствует большему значению высоты на изображении. Введем обозначение локальной концентрации адатомов, соответствующей участкам со сверхструктурой  $7 \times 7$  —  $n_7$ . Известно, что необходимы четыре избыточных адатома из адсорбционного слоя для формирования одной сверхструктурной ячейки  $7 \times 7$ , площадью  $6,26 \text{ нм}^2$  [7]. Получаем, что локальная концентрация адатомов, необходимая для формирования ячейки структуры  $7 \times 7$ , равна  $n_7 = 4/6,26 \text{ нм}^2 = 0,041 \text{ БС}$  (бислой) ( $1 \text{ БС} = 1,56 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$ ) [7]. Используя распределение средней высоты  $h$  нереконструированных участков поверхности и значение концентрации  $n_7$ , на основе подхода, разработанного в работе [12], можно вычислить

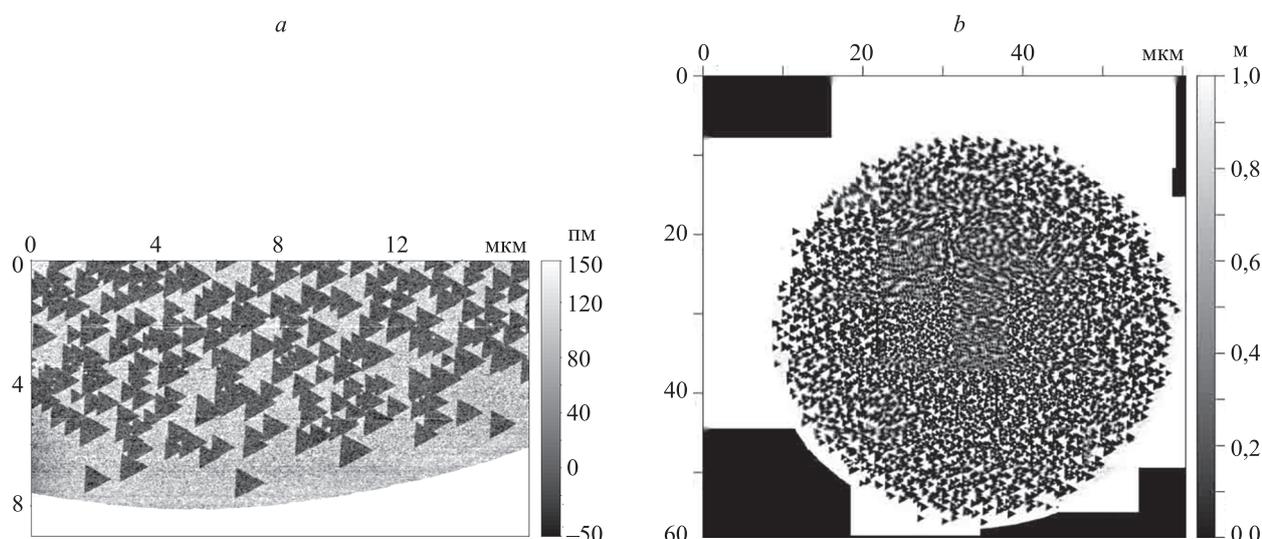


Рис. 1. Экстремально широкая терраса на поверхности Si(111): АСМ-изображение фрагмента террасы вблизи атомной ступени (*a*); панорамное изображение террасы диаметром  $52 \text{ мкм}$  (*b*)

Fig. 1. Extremely wide terrace on the Si(111) surface: AFM image of a fragment of a terrace near an atomic step (*a*); panoramic image of a terrace with a diameter of  $52 \text{ }\mu\text{m}$  (*b*)

локальную концентрацию адатомов  $n$ , существовавшую в рассматриваемой области для сверхструктурного перехода « $1 \times 1$ » →  $7 \times 7$ :

$$n = \alpha h + n_-,$$

где  $\alpha$  — нормировочный коэффициент.

Вблизи атомной ступени на поверхности Si(111) при температурах выше 830 °С концентрация адатомов близка к равновесной  $n \approx n_{eq}$  [11]. При температуре 1090 °С равновесная концентрация составляет 0,21 БС [12]. Тогда при  $\alpha = 1,36 \text{ нм}^{-3}$ , локальной концентрации  $n_- = 0,041 \text{ БС}$  формула для расчета концентрации адатомов принимает вид

$$n = 1,36h + 0,041 \text{ БС}, \quad (1)$$

где средняя высота нереконструированных участков  $h$  задается в нм.

### Результаты

На рис. 2 приведено АСМ-изображение террасы диаметром около 70 мкм, полученной после отжига при температуре 1070 °С. Видно, что терраса является эллипсоидом, немного вытянутым в вертикальном направлении. В верхней части изображения можно видеть дефект морфологии поверхности террасы — двумерный вакансионный островок, сформированный при быстром охлаждении образца. Для анализа распределения концентрации адатомов использована часть террасы, удаленная от данного дефекта.

Для качественного представления распределения адатомов на ее поверхности, терраса разделена на квадратные участки. Для каждого квадрата вычислено значение нормированной площади  $s$  участков со структурой « $1 \times 1$ » поверхности (рис. 3, *a*) [12]. Светлые области соответствуют участкам с большей долей площади высокой атомной плотности. Видно, что доля пло-

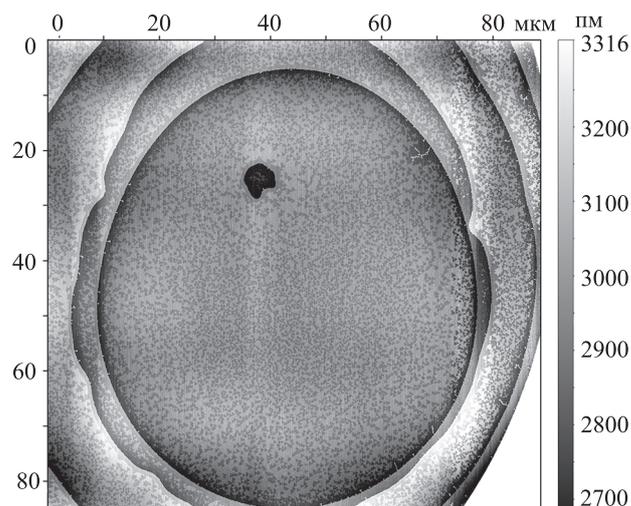


Рис. 2. АСМ-изображение террасы диаметром 70 мкм, полученной после отжига при 1070 °С

Fig. 2. AFM image of a terrace with a diameter of 70 μm obtained after annealing at 1070 °C

щади, занятая участками со структурой « $1 \times 1$ », минимальна в центре, а вблизи краев достигает максимума.

Получено распределение средней высоты  $h(r)$  для данной террасы при разбиении панорамного АСМ-изображения на кольца (рис. 3, *b*). Анализируя экспериментальные данные, построено радиальное распределение концентрации адатомов  $n(r)$  (рис. 4, *a*) с использованием формулы (1). На графике видно, что изменение концентрации между центральными областями ( $n = 0,13 \text{ БС}$ ) и около ступени ( $n = 0,14 \text{ БС}$ ) составляет порядка 0,01 БС и надежно разрешается с учетом случайных отклонений значений от аппроксимации  $n(r)$  для случая центральной круглой террасы, в которой коэффициент диффузии и время жизни считаются постоянной величиной [11]:

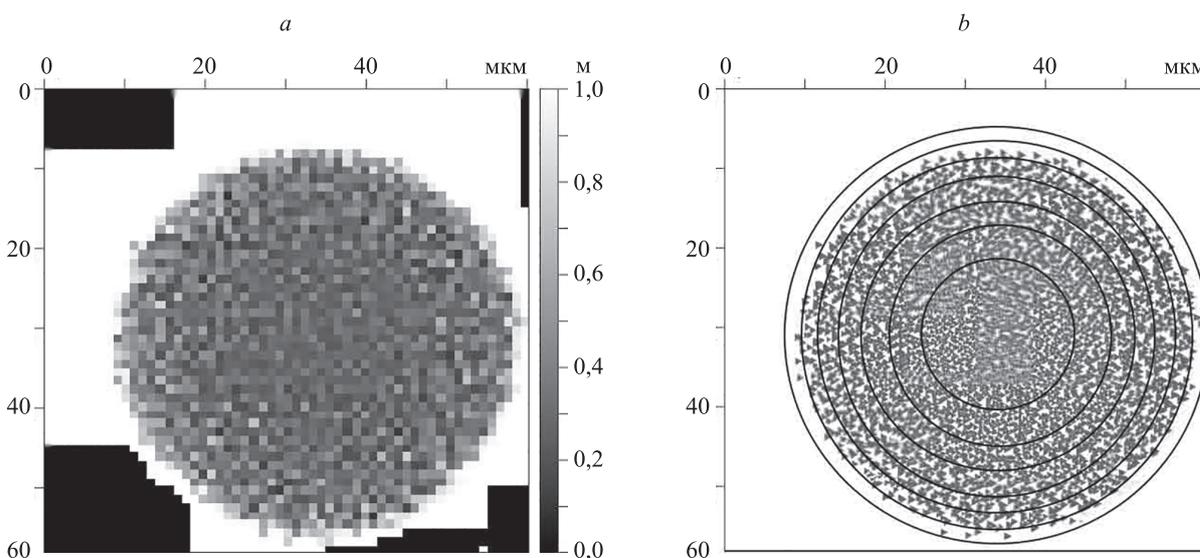


Рис. 3. Распределение доли площади участков с высокой атомной плотностью  $s$  на террасе с разбиением на  $50 \times 50$  квадратов (*a*), схема разбиения террасы диаметром 52 мкм на 7 колец (*b*)

Fig. 3. Distribution of the area fraction of areas with a high atomic density  $s$  on a terrace with a division into  $50 \times 50$  squares (*a*), scheme of the partition of a terrace with a diameter of 52 μm into 7 rings (*b*)

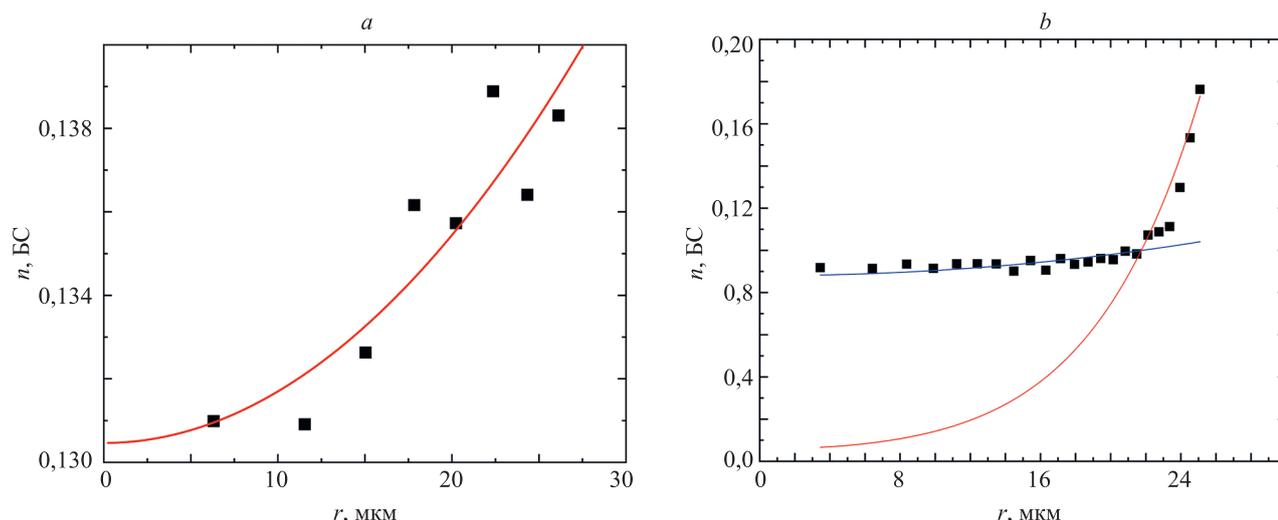


Рис. 4. Радиальное распределение концентрации адатомов на террасе диаметрами: 70 мкм (а); 52 мкм (б)  
 Fig. 4. Radial distribution of adatom concentration on a terrace with a diameter: 70 μm (a); 52 μm (b)

$$n(r) = B_i I_0(\tilde{r}), \quad (2)$$

где  $I_0$  — функция Бесселя первого рода нулевого порядка;  $B_i$  — коэффициент;  $\tilde{r} = r/x_s$ ,  $x_s$  — среднее перемещение атома в адсорбированном состоянии до десорбции (длина диффузии). На основе аппроксимации экспериментального распределения концентрации  $n(r)$  формулой (2) определена длина диффузии адатомов  $x_s = 51 \pm 5$  мкм, соответствующая температуре подложки 1070 °C.

Для вычисления коэффициента диффузии  $D$  необходимо знать время жизни адатома на террасе  $\tau$  до десорбции. Экспериментально получено, что зарождение каждого нового двумерного островка в центре круглой террасы происходило с периодом 136 с, что соответствует сублимации БС адатомов. Тогда средний поток адатомов, с поверхности рассчитываемый по формуле

$$j = \frac{n}{\tau}.$$

составит величину 0,007 БС/с.

Для концентрации адатомов 0,14 БС вблизи края ступени  $\tau = 20$  с.

Коэффициент диффузии  $D$  находится из формулы Эйнштейна для хаотического движения [11]:

$$x_s = \sqrt{D\tau}. \quad (3)$$

Для террасы, охлажденной от 1070 °C, коэффициент диффузии адатомов равен  $59 \pm 12$  мкм<sup>2</sup>/с.

Для образца после отжига при температуре 1090 °C сформировалась терраса диаметром 52 мкм. Следуя такой же методике получения и обработки АСМ-изображения, экспериментально составлено радиальное распределение концентрации адатомов на террасе (рис. 4, б). Видно, что  $n$  возрастает с увеличением расстояния от центра террасы: минимальная концентрация наблюдается в центре террасы ( $n = 0,09$  БС), по мере приближения к ступени  $n$  увеличивается до 0,21 БС. Полученное распределение не описывается формулой (1), так как в интервале  $n = 0,09$ –0,11 БС длина диффу-

зии, рассчитанная на основе аппроксимации (2), предполагающей постоянный диффузионный коэффициент, составила  $30 \pm 4$  мкм, а в интервале  $n = 0,11$ –0,18 БС —  $x_s = 4 \pm 0,2$  мкм. Таким образом, длина диффузии меняется в зависимости от концентрации адатомов на террасе, и подход, описанный в работе [11], предполагающий  $D$  и  $x_s$  константами, не применим для описания распределения концентрации адатомов на экстремально широких террасах поверхности Si(111) при 1090 °C.

В формулу (3) длины диффузии  $x_s$  входят два сомножителя: коэффициент диффузии  $D$  и время жизни адатома на террасе  $\tau$ . Длина диффузии изменяется с 4 до 30 мкм, почти в 8 раз. Для того чтобы это произошло, один из сомножителей должен увеличиться примерно в 64 раза. Поскольку энергия сублимации остается постоянной, значительное увеличение  $\tau$  приведет к возрастанию энергии десорбции адатома и к уменьшению  $n$  вблизи ступени. Это не соответствует реальности, наблюдаемой в эксперименте, поэтому изменением  $\tau$  на террасе можно пренебречь. Для дальнейшего анализа  $n(r)$  решено стационарное уравнение диффузии в предположении, что  $D$  не является постоянной величиной:

$$\nabla(D\nabla n) - \frac{nr}{2\tau} = 0,$$

где  $\nabla$  — оператор градиента.

Перенесем второй член уравнения в правую часть и проинтегрируем полученное выражение по радиусу:

$$\int_0^r \nabla(D\nabla n) dr = \int_0^r \frac{nr}{2\tau} dr.$$

В правой части уравнения перейдем от интегрирования к суммированию по участкам поверхности, для которых из экспериментальных данных рассчитаны  $n_i$  (численное значение концентрации адатомов в  $i$ -ом кольце) и  $r_i$  (средний радиус точек  $i$ -го кольца).

$$D_j \nabla n_j = \sum_{i=0}^j \frac{n_i r_i}{2\tau}.$$

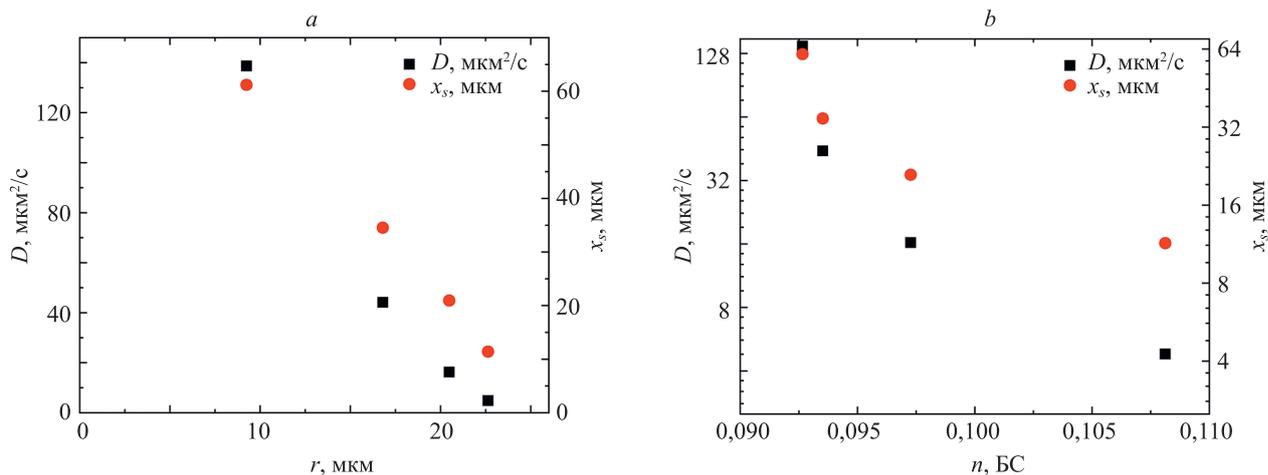


Рис. 5. Радиальное распределение коэффициента диффузии  $D$  и длины диффузии  $x_s$  (а) и их зависимость от концентрации адатомов (б)

Fig. 5. Radial distribution of the diffusion coefficient  $D$  and diffusion length  $x_s$  (a), their dependence on the concentration of adatoms (b)

Выразим коэффициент диффузии в  $j$ -ом кольце:

$$D_j = \frac{\sum_{i=0}^j n_i r_i}{\nabla n_j}. \quad (4)$$

На основе выражения (4) построено радиальное распределение коэффициента диффузии  $D$ , обозначенное черными квадратами на рис. 5, а. Видно, что в центральной области круглой террасы  $D$  увеличивается и достигает максимального значения 140 мкм<sup>2</sup>/с, а вблизи ступени — уменьшается до 5 мкм<sup>2</sup>/с.

Построена зависимость коэффициента диффузии  $D$  от локальной концентрации адатомов  $n$  в логарифмическом масштабе (рис. 5, б). Физической причиной такого сильного изменения  $D$  может быть изменение концентрации адатомов. В рамках классических теоретических подходов [14] поверхностная диффузия рассматривается как диффузия невзаимодействующих частиц. В условиях, когда концентрация адатомов может достигать 0,2 БС, взаимодействие частиц может привести к уменьшению коэффициента диффузии. Оценим концентрацию адатомов, при которой может наблюдаться данный эффект. Известно, что адатом образует с поверхностью Si(111) три ковалентные связи [15]. Чтобы насытить все оборванные связи на поверхности Si(111) концентрация адатомов должна достигнуть  $1/3 \text{ MC} \approx 0,167 \text{ БС}$ . Тогда диффузия адатомов с концентрацией, близкой к 0,167 БС и выше, должна отличаться от диффузии адатомов с концентрацией  $n \leq 0,167 \text{ БС}$  из-за принципиального изменения свойств адсорбционного слоя при концентрации 0,167 БС.

В предположении, что время жизни адатома на террасе  $\tau$  можно считать постоянным, радиальное распределение  $x_s$  ведет себя аналогично  $D$  (рис. 5, а). Вблизи центра террасы длина диффузии  $x_s$  достигает макси-

мального значения 64 мкм, около ступени  $x_s$  уменьшается до 10 мкм. На рис. 5, б приведена зависимость длины диффузии от концентрации адатомов в логарифмическом масштабе. Аналогично зависимости  $D(n)$ ,  $x_s$  быстро растет при уменьшении  $n$ , и наоборот, уменьшается при ее высоких значениях  $n$  возле ступени.

### Заключение

Экспериментально получены радиальные распределения концентрации адатомов  $n$  для террас на поверхности Si(111) диаметром 70 и 52 мкм, быстро охлажденных от температур 1070 °С и 1090 °С, соответственно. При 1070 °С в центре террасы  $n$  принимает минимальные значения около 0,13 БС, по мере приближения к атомной ступени  $n$  возрастет до 0,14 БС. Полученная зависимость  $n(r)$  описывается теоретическим подходом, предполагающим постоянный коэффициент диффузии. Получено, что коэффициент поверхностной диффузии адатомов на поверхности Si(111) при 1070 °С равен  $59 \pm 12 \text{ мкм}^2/\text{с}$ . Показано, что при 1090 °С подход, который предполагает одинаковую длину диффузии адатомов по всей террасе, не описывает экспериментальное распределение  $n(r)$ .

Разработан подход для анализа неоднородности коэффициента диффузии на круглых террасах поверхности Si(111), основанный на анализе радиального распределения концентрации адатомов  $n(r)$ , измеряемого экспериментально с использованием атомно-силовой микроскопии. Показано, что коэффициент диффузии адатомов зависит от их локальной концентрации  $n$ . В предположении независимости времени жизни адатомов от  $n$  получено, что при 1090 °С коэффициент диффузии адатомов уменьшается от 140 мкм<sup>2</sup>/с при  $n = 0,093 \text{ БС}$  в центральных областях террасы до 5 мкм<sup>2</sup>/с при  $n = 0,118 \text{ БС}$  вблизи ступени.

## Литература

## References

- Misbah C., Pierre-Louis O., Saito Y. Crystal surfaces in and out of equilibrium: A modern view // *Reviews of Modern Physics*. 2010. V. 82. N 1. P. 981–1040. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.981>
- Evans J.W., Thiel P.A., Bartelt M.C. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds // *Surface Science Reports*. 2006. V. 61. N 1-2. P. 1–128. <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2005.08.004>
- Латышев А.В., Асеев А.Л. Моноатомные ступени на поверхности кремния. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. 241 с.
- Rogilo D.I., Fedina L.I., Kosolobov S.S., Rangelov B.S., Latyshev A.V. Critical terrace width for two-dimensional nucleation during Si growth on Si(111)-(7 × 7) surface // *Physical Review Letters*. 2013. V. 111. N 3. P. 036105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.036105>
- Takayanagi K., Tanishiro Y., Takahashi S., Takahashi M. Structure analysis of Si(111)-7 × 7 reconstructed surface by transmission electron diffraction // *Surface Science*. 1985. V. 164. N 2-3. P. 367–392. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(85\)90753-8](https://doi.org/10.1016/0039-6028(85)90753-8)
- Lander J.J., Morrison J. Structures of clean surfaces of germanium and silicon. I // *Journal of Applied Physics*. 1963. V. 34. N 5. P. 1403–1410. <https://doi.org/10.1063/1.1729590>
- Yang Y.-N., Williams E.D. High atom density in the “1×1” phase and origin of the metastable reconstructions on Si(111) // *Physical Review Letters*. 1994. V. 72. N 12. P. 1862–1865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.1862>
- Ong W.J., Tok E.S. Real time dynamics of Si magic clusters mediating phase transformation: Si(111)-(1×1) to (7×7) reconstruction revisited // *Surface Science*. 2012. V. 606. N 13-14. P. 1037–1044. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2012.02.025>
- Nasimov D.A., Sheglov D.V., Rodyakina E.E., Kosolobov S.S., Fedina L.I., Teys S.A., Latyshev A.V. AFM and STM studies of quenched Si(111) surface // *Physics of Low-Dimensional Structures*. 2003. V. 3-4. P. 157–166.
- Harrison W.A. Surface reconstruction on semiconductors // *Surface Science*. 1976. V. 55. N 1. P. 1–19. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(76\)90372-1](https://doi.org/10.1016/0039-6028(76)90372-1)
- Pang A.B., Man K.L., Altman M.S., Stasevich T.J., Szalma F., Einstein T.L. Step line tension and step morphological evolution on the Si(111)(1 × 1) surface // *Physical Review B*. 2008. V. 77. N 11. P. 115424. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.115424>
- Rogilo D.I., Rybin N.E., Fedina L.I., Latyshev A.V. Adatom concentration distribution on an extrawide Si(111) terrace during sublimation // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2016. V. 52. N 5. P. 501–507. <https://doi.org/10.3103/S8756699016050125>
- Sitnikov S., Kosolobov S., Latyshev A. Attachment–detachment limited kinetics on ultra-flat Si(111) surface under etching with molecular oxygen at elevated temperatures // *Surface Science*. 2015. V. 633. P. L1–L5. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2014.12.004>
- Fick A. On liquid diffusion // *Journal of Membrane Science*. 1995. V. 100. N 1. P. 33–38. [https://doi.org/10.1016/0376-7388\(94\)00230-V](https://doi.org/10.1016/0376-7388(94)00230-V)
- Meade R.D., Vanderbilt D. Adatoms on Si(111) and Ge(111) surfaces // *Physical Review B*. 1989. V. 40. N 6. P. 3905–3913. <https://doi.org/10.1103/physrevb.40.3905>
- Misbah C., Pierre-Louis O., Saito Y. Crystal surfaces in and out of equilibrium: A modern view. *Reviews of Modern Physics*, 2010, vol. 82, no. 1, pp. 981–1040. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.981>
- Evans J.W., Thiel P.A., Bartelt M.C. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds. *Surface Science Reports*, 2006, vol. 61, no. 1-2, pp. 1–128. <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2005.08.004>
- Latyshev A.V., Aseev A.L. *Monatomic Steps on Silicon Surfaces*. Novosibirsk, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences Publ., 2006, 241 p. (in Russian)
- Rogilo D.I., Fedina L.I., Kosolobov S.S., Rangelov B.S., Latyshev A.V. Critical terrace width for two-dimensional nucleation during Si growth on Si(111)-(7 × 7) surface. *Physical Review Letters*, 2013, vol. 111, no. 3, pp. 036105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.036105>
- Takayanagi K., Tanishiro Y., Takahashi S., Takahashi M. Structure analysis of Si(111)-7 × 7 reconstructed surface by transmission electron diffraction. *Surface Science*, 1985, vol. 164, no. 2-3, pp. 367–392. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(85\)90753-8](https://doi.org/10.1016/0039-6028(85)90753-8)
- Lander J.J., Morrison J. Structures of clean surfaces of germanium and silicon. I. *Journal of Applied Physics*, 1963, vol. 34, no. 5, pp. 1403–1410. <https://doi.org/10.1063/1.1729590>
- Yang Y.-N., Williams E.D. High atom density in the “1×1” phase and origin of the metastable reconstructions on Si(111). *Physical Review Letters*, 1994, vol. 72, no. 12, pp. 1862–1865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.1862>
- Ong W.J., Tok E.S. Real time dynamics of Si magic clusters mediating phase transformation: Si(111)-(1 × 1) to (7 × 7) reconstruction revisited. *Surface Science*, 2012, vol. 606, no. 13-14, pp. 1037–1044. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2012.02.025>
- Nasimov D.A., Sheglov D.V., Rodyakina E.E., Kosolobov S.S., Fedina L.I., Teys S.A., Latyshev A.V. AFM and STM studies of quenched Si(111) surface. *Physics of Low-Dimensional Structures*, 2003, vol. 3-4, pp. 157–166.
- Harrison W.A. Surface reconstruction on semiconductors. *Surface Science*, 1976, vol. 55, no. 1, pp. 1–19. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(76\)90372-1](https://doi.org/10.1016/0039-6028(76)90372-1)
- Pang A.B., Man K.L., Altman M.S., Stasevich T.J., Szalma F., Einstein T.L. Step line tension and step morphological evolution on the Si(111)(1 × 1) surface. *Physical Review B*, 2008, vol. 77, no. 11, pp. 115424. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.115424>
- Rogilo D.I., Rybin N.E., Fedina L.I., Latyshev A.V. Adatom concentration distribution on an extrawide Si(111) terrace during sublimation. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2016, vol. 52, no. 5, pp. 501–507. <https://doi.org/10.3103/S8756699016050125>
- Sitnikov S., Kosolobov S., Latyshev A. Attachment–detachment limited kinetics on ultra-flat Si(111) surface under etching with molecular oxygen at elevated temperatures. *Surface Science*, 2015, vol. 633, pp. L1–L5. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2014.12.004>
- Fick A. On liquid diffusion. *Journal of Membrane Science*, 1995, vol. 100, no. 1, pp. 33–38. [https://doi.org/10.1016/0376-7388\(94\)00230-V](https://doi.org/10.1016/0376-7388(94)00230-V)
- Meade R.D., Vanderbilt D. Adatoms on Si(111) and Ge(111) surfaces. *Physical Review B*, 1989, vol. 40, no. 6, pp. 3905–3913. <https://doi.org/10.1103/physrevb.40.3905>

## Авторы

## Authors

**Соловьева Евгения Олеговна** — лаборант, Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, 630090, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-6822-5279>, [eugeniasoloveva11@gmail.com](mailto:eugeniasoloveva11@gmail.com)

**Рогило Дмитрий Игоревич** — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, 630090, Российская Федерация, [sc 35115461100](https://orcid.org/0000-0002-7586-0107), <https://orcid.org/0000-0002-7586-0107>, [rogilod@gmail.com](mailto:rogilod@gmail.com)

**Щеглов Дмитрий Владимирович** — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, 630090, Российская Федерация, [sc 6603381702](https://orcid.org/0000-0002-5220-8781), <https://orcid.org/0000-0002-5220-8781>, [sheglov@isp.nsc.ru](mailto:sheglov@isp.nsc.ru)

**Evgenia O. Soloveva** — Laboratory Assistant, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-6822-5279>, [eugeniasoloveva11@gmail.com](mailto:eugeniasoloveva11@gmail.com)

**Dmitry I. Rogilo** — PhD, Scientific Researcher, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russian Federation, [sc 35115461100](https://orcid.org/0000-0002-7586-0107), <https://orcid.org/0000-0002-7586-0107>, [rogilod@gmail.com](mailto:rogilod@gmail.com)

**Dmitry V. Sheglov** — PhD, Senior Researcher, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russian Federation, [sc 6603381702](https://orcid.org/0000-0002-5220-8781), <https://orcid.org/0000-0002-5220-8781>, [sheglov@isp.nsc.ru](mailto:sheglov@isp.nsc.ru)

наук, Новосибирск, 630090, Российская Федерация,  6603381702, <https://orcid.org/0000-0002-5220-8781>, [sheglov@isp.nsc.ru](mailto:sheglov@isp.nsc.ru)

**Латышев Александр Васильевич** — доктор физико-математических наук, директор, Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, 630090, Российская Федерация,  7005151705, <https://orcid.org/0000-0002-4016-593X>, [latyshev@isp.nsc.ru](mailto:latyshev@isp.nsc.ru)

**Alexander V. Latyshev** — D.Sc., Director, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russian Federation,  7005151705, <https://orcid.org/0000-0002-4016-593X>, [latyshev@isp.nsc.ru](mailto:latyshev@isp.nsc.ru)

*Статья поступила в редакцию 18.07.2021*  
*Одобрена после рецензирования 09.08.2021*  
*Принята к печати 04.10.2021*

*Received 18.07.2021*  
*Approved after reviewing 09.08.2021*  
*Accepted 04.10.2021*



Работа доступна по лицензии  
Creative Commons  
«Attribution-NonCommercial»