

раakter и, по-видимому, могут свидетельствовать о применимости моттовской концепции минимальной металлической проводимости.

1. Dobrego V. P., Ermolaev O. P., Tkachev V. D. // *Physica Status Solidi (a)*. 1977. V. 44. № 2. P. 435.
2. Ермолаев О. П. // *Весті АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук*. 1995. № 1. С. 70.
3. Abrahams E., Anderson P. W., Licciardello D. C., Ramakrishnan T. V. // *Phys. Rev. Lett.* 1979. V. 42. № 10. С. 673.
4. Мотт Н. Ф. *Переходы металл-изолятор*. М., 1979.

Поступила в редакцию 20.04.95.

УДК 621.921.34:666.233

Л. О. МЕЛЕШКО

ГОМОГЕННОЕ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЕ АЛМАЗА В ОБЛАСТИ ЕГО МЕТАСТАБИЛЬНОСТИ

The radii of critical nuclei, their formation activities and the number of the atoms contained have been calculated for diamond and graphite at different gas phase oversaturations.

В связи с потребностями практики в последние десятилетия интенсивно ведется поиск метода получения эпитаксиальных пленок алмаза. К настоящему времени в решении этой задачи достигнуты существенные успехи: доказана возможность синтеза алмаза из углеродсодержащих молекул в области его метастабильности, получены неоднородные по толщине эпитаксиальные пленки площадью в несколько мм² на алмазных подложках. Однако современное приборостроение нуждается в однородных монокристаллических пленках алмаза значительно больших размеров (диаметром до 10 дюймов).

Многочисленные попытки исследователей различных стран мира решить эту проблему известным методом эпитаксиального наращивания, в основе которого лежит лишь свойство поверхностного слоя подложки оказывать ориентирующее действие на процесс формирования структуры пленки, не привели к желаемым результатам. Анализ причин неудач привел нас к убеждению в необходимости нахождения иного пути для достижения поставленной цели. Результатом поиска явилась разработка новой концепции, в основу которой положено свойство вещества формировать различные структуры в зависимости от условий, определяющих процесс фазового превращения. В соответствии с этой концепцией, прежде чем начинать наращивание эпитаксиальной пленки необходимо определить параметры синтеза, при которых данное вещество формируется в виде совершенного монокристалла. Только после этого можно подбирать подложку с учетом ее влияния на кристаллизующееся вещество. Соблюдение такой последовательности при наращивании эпитаксиальной пленки на собственном монокристалле будет способствовать формированию однородной монокристаллической пленки по всей ее толщине. В случае инородной подложки у границы раздела будет образовываться в большей или меньшей степени деформированный слой, переходящий в однородный монокристалл по мере увеличения толщины пленки. При этом после удаления (например, стравливания) подложки может быть получена основа для последующего наращивания однородной монокристаллической пленки любой толщины.

Практическое решение данной проблемы в свете новой разработанной нами концепции требует исключительного внимания к теоретическим исследованиям, ведущим к познанию самого явления эпитаксии: механизма зарождения и формирования тонких пленок, образования в них дефектов, роли подложки. Одной из важнейших проблем синтеза является стадия зародышеобразования, которой определяются структура и свой-

ство материала. Этой стадии посвящается настоящая работа. В ней приводятся результаты выполненных нами расчетов по гомогенному образованию зародышей алмаза и графита при различных пересыщениях газовой фазы.

Согласно классической теории фазовых превращений, образование новой фазы (B) в объеме старой (A) начинается с возникновения зародышей, которые после достижения критических размеров способны к дальнейшему росту. Если W атомов фазы A образовало зародыш фазы B , тогда термодинамический потенциал Z системы изменится на величину ΔZ [1]:

$$\Delta Z = n(\mu_B - \mu_A) + \alpha n^{2/3}, \quad (1)$$

где n — число частиц зародыша новой фазы; μ_B, μ_A — химические потенциалы фазы B и A соответственно; $n^{2/3}$ — число, пропорциональное поверхности зародыша; α — величина, характеризующая поверхностный потенциал между фазами A и B .

Т а б л и ц а 1

$\ln \frac{p}{p_0}$	Алмаз		
	$r_k \cdot 10^{10} \text{ м}$	$A_k \cdot 10^{17} \text{ Дж}$	$n_k \text{ атомов}$
0,0953101	250,663	973,807	11632200
0,1823215	131,036	266,118	1661750
0,3364722	71,0037	78,1362	264383
0,6931471	34,4671	18,4119	30242
1,0986122	21,7463	7,32929	7595
1,6094379	14,8441	3,41508	2416
2,302585	10,3756	1,66876	825
2,9957322	7,97494	0,985701	375
3,912023	6,10701	0,578026	168
6,9077552	3,45854	0,185385	30

Наиболее вероятной формой первичного зародыша является сфера, поскольку из всех возможных форм для данного объема она обладает наименьшей свободной энергией. В этом случае уравнение [1] примет вид:

$$\Delta Z = \frac{4}{3} \frac{\pi r^3}{V_B} (\mu_B - \mu_A) + 4\pi r^2 \sigma, \quad (2)$$

где r — радиус зародыша новой фазы; V_B — объем, приходящийся на одну частицу; σ — поверхностное натяжение на границе между обеими фа-

зами. Первый член правой части уравнения [2] $\frac{4}{3} \frac{\pi r^3}{V_B} (\mu_B - \mu_A)$ может быть как положительным, так и отрицательным в зависимости от соотношения μ_B и μ_A , второй $4\pi r^2 \sigma$ — только положительным. В термодинамически устойчивой фазе ($\mu_A < \mu_B$) зародыши новой фазы нежизнеспособны: они могут появляться, достигать некоторых размеров, а затем исчезать. Если же маточная фаза находится в метастабильном состоянии ($\mu_A > \mu_B$), тогда зародыши новой фазы после достижения критических размеров ($r=r_k$), соответствующих максимуму потенциала ΔZ , приобретают устойчивость и способны к дальнейшему росту. При $\mu_A < \mu_B$ зародыши

новой фазы образуют устойчивую «популяцию», характеризующуюся постоянством общего числа и распределением по размерам, которые определяются формулой Больцмана:

$$N_r = C \exp[-\Delta Z(r) / kT], \quad (3)$$

где N_r — число комплексов, состоящих из n простых частиц; C — коэффициент пропорциональности, k — постоянная Больцмана.

Т а б л и ц а 2

$\ln \frac{p}{p_0}$	Графит			A_k (графита)/ A_k (алмаза)
	$r_k \cdot 10^{10}$ м	$A_k \cdot 10^{17}$ Дж	n_k атомов	
0,0953101	331,034	1422,96	16997629	1,4612341
0,1823215	173,05	388,86	2428206	1,4612314
0,3364722	93,7697	114,176	386330	1,4612433
0,6931471	45,5183	26,9043	44190	1,4612451
1,0986122	28,7188	10,7098	11099	1,4612366
1,6094379	19,6036	4,99024	3530	1,4612366
2,302585	13,7023	2,43801	1200	1,460971
2,9957322	10,5319	1,44033	547	1,461224
3,912023	8,06511	0,84438	246	1,4607993
6,9077552	4,56746	0,270894	45	1,4612509

Радиус зародыша критических размеров (r_k) легко определить, находя максимум уравнения [2] относительно r :

$$r_k = \frac{2\sigma V_B}{\mu_A - \mu_B}. \quad (4)$$

Для случая, когда маточной фазой является газообразная, а новой — кристаллическая, разность химических потенциалов $\mu_A - \mu_B$ может быть выражена через параметры, характеризующие отклонение системы от положения равновесия, в виде [1]:

$$\mu_A - \mu_B \approx kT \ln \frac{p}{p_0}, \quad (5)$$

где p — давление пересыщенного пара; p_0 — равновесное давление пара. Подставляя выражение (5) в (4), получаем

$$r_k = \frac{2\sigma V_B}{kT \ln \frac{p}{p_0}}. \quad (6)$$

Решая совместно (6) и (2), находим выражение работы A_k образования зародыша критических размеров r_k в виде

$$A_k = \frac{4}{3} \pi r_k^2 \sigma. \quad (7)$$

Число молекул (атомов) n_k , содержащихся в зародыше радиуса r_k , определим из выражения

$$n_k = \frac{\frac{4}{3} \pi \rho r_k^3}{m_c}, \quad (8)$$

где ρ — плотность зародыша; m_c — масса молекулы (атома).

В настоящей работе приводятся результаты расчетов r_k , A_k , n_k для поликристаллического алмаза и графита, выполненных нами по формулам

(6—8) при различных пересыщениях газовой фазы ($T=1273K$) (см. табл. 1, 2). Полученные данные показывают, что при малых пересыщениях радиусы критических зародышей, работы их образования и числа содержащихся в них атомов необычайно велики и, следовательно, вероятность возникновения новой фазы в данных условиях ничтожна, но она резко возрастает с увеличением пересыщения вследствие уменьшения A_k . Из сравнения отношений A_k (графита) / A_k (алмаза) следует, что для рассмотренного интервала пересыщений вероятность зарождения центров кристаллизации графита меньше, чем алмаза.

Это соотношение может еще увеличиться, если учесть лапласовское давление, возникающее внутри зародышей новой фазы, обуславливающее возможность перехода системы в область стабильного состояния алмаза.

1. Френкель Я. И. // Собр. избр. тр. М.; Л., 1959. Т. 3.

Поступила в редакцию 08.09.95.

УДК 621.382.049.772

А. П. НОВИКОВ, Е. А. ШИЛОВА,
Л. Д. БУЙКО, В. А. ЗАЙКОВ

ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА МЕТАЛЛ/а-С В УСЛОВИЯХ ВАКУУМНОГО ОТЖИГА

Thermal stability at the interface of vanadium/amorphous carbon (V/a-C) and tantalum/amorphous carbon (Ta/a-C) systems have been investigated by the methods of TEM, RBS, AES, and Raman spectroscopy. Thermal annealing of V/a-C, Ta/a-C thin-film structures has been carried out in a vacuum furnace at temperatures ranged from 100 to 1000 C.

The conducted investigations have revealed that 400 C and 700 C are the threshold temperatures at which diffusion of carbon atoms to vanadium and tantalum films, respectively, begins to proceed and inclusions of carbide phases are formed.

Regularities of structural changes and reactions at the metal/a-C interface are discussed for a group of refractory metals.

При создании любого полупроводникового прибора формирование омических контактов является одним из важнейших технологических процессов, поскольку именно качество контакта определяет характеристики и надежность работы всего устройства.

Установлено, что в процессе термического отжига в пленке металла наблюдается образование соответствующих карбидов. Показана возможность формирования удовлетворительных омических контактов к полупроводниковым алмазам в процессе отжига на основе использования тонких пленок карбидообразующих металлов.

В настоящей работе исследуются структурные и фазовые изменения и реакции на границе раздела в системах ванадий/аморфный углерод (V/a-C) и тантал/аморфный углерод (Ta/a-C) при стационарном часовом вакуумном отжиге. Помимо самостоятельного интереса, данная система может рассматриваться в качестве модельной для прогнозирования свойств границы раздела Та/алмаз.

Материал и методика

Углеродные и металлические пленки наносились с помощью магнетронного распылительного устройства, работающего на постоянном токе, на кремниевые пластины диаметром 100 мм. Время напыления составляло 90 мин для углерода и 2 мин для металлов. Полученные тонкопленочные системы Ta/a-C/Si и V/a-C/Si подвергались часовому отжигу в ваку-