

## Влияние энтропийных эффектов на диффузию адатома на поверхности кластера

Л. С. Булушова <sup>a</sup>, О. А. Чичигина <sup>b</sup>

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра общей физики и волновых процессов. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

E-mail: <sup>a</sup>bul-lidia@yandex.ru, <sup>b</sup>chichigina@ilc.edu.ru

Статья поступила 01.10.2009, подписана в печать 24.12.2009

Рассмотрена медленная диффузия адатома на периодической поверхности еще не окончательно сформировавшегося верхнего слоя растущего кристалла. Исследовано движение островков (кластеров) как фактор, ускоряющий диффузию адатома и приводящий к увеличению энтропии по сравнению со случаем уже сформировавшегося неподвижного слоя подложки. Рассчитаны коэффициент диффузии, энтропия и эффективные температуры, характеризующие эти свойства подложки.

*Ключевые слова:* поверхностная диффузия, эффективная температура, квазиравновесное распределение Больцмана, время Крамерса.

УДК: 536.75, 536.-12.01, 536.216.1, 539.23. PACS: 05.04.-a, 05.70 Np, 68.35 Md, 68.43 Jk.

### Введение

Современные возможности непосредственного наблюдения диффузии адатомов на поверхности растущего кристалла предоставляют богатый материал для теоретического осмысления [1, 2]. Эта диффузия является сложным процессом, включающим множество квантовых эффектов, зависящих от химических свойств как адатома, так и вещества подложки. В большинстве случаев задача сводится к классическому движению некоторой частицы с эффективной массой в потенциальном рельефе, причем как эффективная масса, так и форма рельефа зависят одновременно от химических свойств адатома и поверхности. Современные химики умеют совершать такой переход к потенциальному рельефу для огромного числа веществ, а для физика представляется интересной общая задача о движении адатома по периодической поверхности. Установить связь между видом потенциального рельефа и температурной зависимостью коэффициента диффузии важно еще и потому, что во многих случаях решается обратная задача: по экспериментальным данным непосредственного наблюдения диффузии проводится моделирование потенциального рельефа.

В общем виде получается следующая картина: несколько адатомов на поверхности растущего кристалла с размером ячейки  $R$  двигаются по законам броуновского движения, встречаются друг с другом, соединяются и образуют небольшие островки (кластеры) из нескольких адатомов. Эти островки продолжают хаотически двигаться как целое с меньшей скоростью, определяемой температурой подложки.

Энергия активации одиночного адатома на поверхности составляет около 0.8–2 эВ [3]. Энергия активации кластера, состоящего из нескольких атомов, зависит не только от числа формирующих кластер атомов, но и от формы кластера, изменяясь по мере роста кластера нелинейно [4–8]. На поверхность таких островков оседают адатомы, которые также движутся

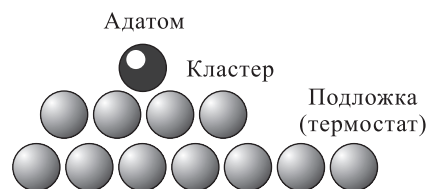


Рис. 1. Адатом на кластере

на них (рис. 1) [9]. Скорость этой диффузии задает тип роста кристалла. Если она достаточно велика, то адатом успевает продвинуться к краю острова, спуститься и присоединиться к острову, увеличив его размер. Таким образом, происходит монослойный рост кристалла. При малой скорости диффузии адатома на поверхности острова рост будет многослойным. Аналитическое описание такой диффузии на поверхности кластера и является основной целью этой работы.

Экспериментальные измерения дают значение коэффициента диффузии несколько большее, чем расчетные. Множество объяснений такого ускорения диффузии приведено в литературе. Например, туннельные эффекты перехода из одной ямы в другую, перескоки на расстояния большие периода кристаллической решетки, изменения энергии активации, вызванные граничными эффектами, и многое другое. Тем не менее изменение статистики тепловых флуктуаций, вызванное тем, что верхняя поверхность еще находится на стадии формирования, не учтено. Задачей настоящей работы является исследование энтропийных факторов, влияющих на диффузию адатома. В работе показано увеличение коэффициента диффузии как результат увеличения энтропии системы. А именно нами учтена возможность случайного блуждания островка (кластера), на котором происходит диффузия адатома. Такое блуждание происходит в виде редких, быстрых скачков в соседнее положение. Возникающие при этом силы инерции в системе отсчета, связанной с островком, приводят к большим скачкам адатомов. Это сильно меняет статистику длин пробега и приводит к появлению картины, сходной

с супердиффузией. При этом соблюдены условия теплового равновесия с термостатом, роль которого играет подложка.

Будем считать, что переходы под действием теплового шума происходят одинаково для адатома и для кластера и отличаются только количественно. При описании этих процессов в первом разделе будем говорить о движении броуновской частицы, называя так в соответствующих случаях адатом или кластер. Во втором разделе будут рассмотрены два основных типа движения адатома на кластере с использованием количественного различия основных характеристик.

**1. Движение броуновской частицы по периодической потенциальной поверхности**

**1.1. Однотипные хаотические движения разного масштаба**

Рассмотрим случай медленной диффузии, когда частица достаточно долго находится в потенциальной яме, а потом скачком совершает переход в соседнюю яму. Для адатома яма соответствует одной ячейке с характерным размером (радиусом)  $R$ , а потенциальная энергия  $U(\mathbf{r}) < 0$  характеризуется глубиной ямы  $U_{\min} < 0$  и условием  $U(R) = 0$  (рис. 2). Для кластера вводится некоторый эффективный потенциал, задающий энергию активации  $\tilde{E}$  (высоту эффективного потенциального барьера). В работе [10] показано, что для диффузии двухмерного кластера  $\text{Cu}$ , состоящего из семи атомов на поверхности  $\text{Cu}(111)$ , эта энергия активации на три порядка больше, чем для единичного атома  $|\tilde{E}| \gg |U_{\min}|$ .

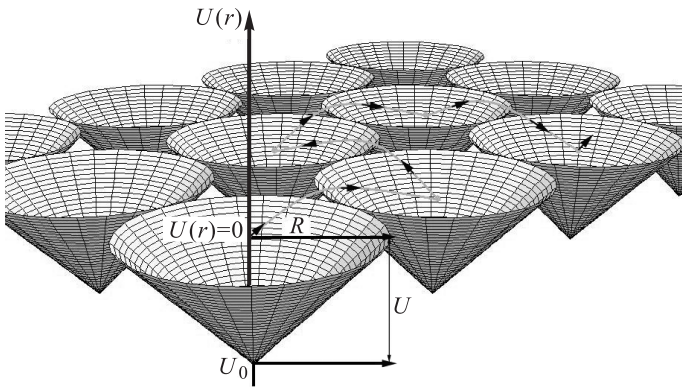


Рис. 2. Модель структуры поверхности, состоящей из потенциальных ям радиуса  $R$  и глубины  $U_0$

В указанном случае медленной диффузии состояние частицы внутри ямы можно считать близким к равновесному, а интенсивность случайных воздействий в этом состоянии характеризовать вводимым в настоящей работе параметром  $T_{\text{in}}$ , названным внутренней температурой. Соответственно случайное движение из одной ямы в другую и кинетическую энергию этого движения можно связать с внешней температурой  $T_{\text{out}}$ . В этом случае непрерывное движение внутри ямы и переходы из ямы в яму в дискретном пространстве рассматриваются как хаотические движения разного масштаба.

**1.2. Внутренняя температура**

Значение внутренней температуры оценивается в работах [11–13] на основе квазиравновесного распределения Больцмана, которое характеризует положение частицы в яме и задается выражением

$$\omega(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \exp\left(\frac{\langle U \rangle - U(\mathbf{r})\alpha}{kT}\right), \tag{1}$$

где  $\Omega = 2\pi R$  — двухмерный объем ямы,  $k$  — постоянная Больцмана. Константа  $\alpha$  характеризует неравновесность системы. Случай  $\alpha = 1$  соответствует равновесному распределению Больцмана. Это распределение отличается от больцмановского только перенормировкой температуры

$$T_{\text{in}} = T/\alpha,$$

где  $\alpha$  определяется уравнениями

$$\begin{cases} \int \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} = \Omega \exp\left(\frac{-\langle U \rangle}{kT}\right), \\ \int U \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} = \langle U \rangle \Omega \exp\left(\frac{-\langle U \rangle}{kT}\right). \end{cases} \tag{2}$$

Первое из этих уравнений получается из условия нормировки, а второе — из того факта, что  $\langle U \rangle$  является математическим ожиданием  $U$ . Внутренняя эффективная температура  $T_{\text{in}}$  всегда меньше реальной  $T$ , и эта разница имеет максимум. На рис. 3 показана зависимость отношения внутренней эффективной температуры к реальной  $T_{\text{in}}/T$  от глубины потенциальной ямы  $|U_{\min}|/kT$  (так же нормированной на  $T$ ) при фиксированном значении реальной температуры и прочих параметров для двух различных видов потенциальных ям, взятых в виде степенной зависимости со степенью  $n = 1$  и  $n = 2$ ,

$$U(r) = U_{\min} \left(1 - \left(\frac{r}{R}\right)^n\right).$$

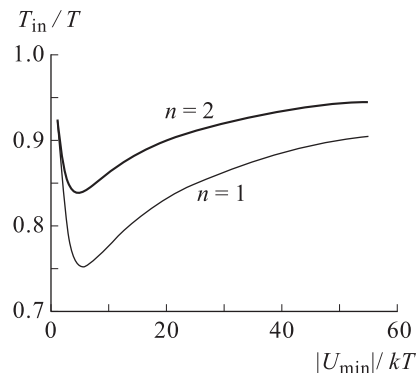


Рис. 3. Зависимость внутренней температуры от глубины для конусообразной (1), и параболической (2) потенциальных ям. Величины нормированы на температуру

Тот факт, что  $T_{\text{in}} < T$ , можно интерпретировать еще и таким образом, что тепловые флуктуации термостата, действующие на частицу в яме и характеризующиеся температурой  $T$ , можно условно разделить на слабые, не приводящие к выходу из ямы, и сильные, выбивающие частицу из ямы. Внутренняя температура связана только со слабыми флуктуациями. Противоречия со

вторым законом термодинамики не происходит из-за того, что мезоскопический процесс переходов между ямами является измерением по отношению к микроскопическому процессу движения внутри ямы, этот вопрос подробно рассматривается в [13, 14].

**1.3. Среднее время выхода**

Среднее время выхода, так называемое время Крамера [15], подсчитано в работах [11–13] и может быть выражено через вероятность выхода в единицу времени:

$$\frac{1}{\tau} = \langle v \rangle^+ L \omega(L), \tag{3}$$

где  $\langle v \rangle^+ = \sqrt{kT_{\text{out}}/2\pi m}$  — средняя положительная проекция скорости частицы на направление внешней нормали,  $L = 2\pi R$  — длина границы ямы,  $\omega(L)$  — квазиравновесное распределение вероятностей для координат (1) на границе ямы. Подставляя эти выражения в (3), получаем

$$\tau = \frac{t_{\text{out}}}{2} e^{-\langle U \rangle/kT},$$

где введено время, характеризующее прохождение барьера,

$$t_{\text{out}} = \frac{R}{\langle v \rangle^+}. \tag{4}$$

Для частного случая одномерной параболической ямы ( $n = 2$ ) выражение (3) совпадает законом Арениуса с единичным пре-фактором [16].

**1.4. Внешняя температура**

Внешняя температура определяется как средняя кинетическая энергия дискретного движения из одной ямы в другую. Этот переход происходит в течение времени  $t_{\text{out}}$  на расстояние  $2R$  в среднем один раз за время  $\tau$ , т. е. является импульсным процессом [17].

Учитывая то, что движения вдоль каждого из двух направлений аналогичны, можно рассмотреть скорость вдоль одной оси. Время между скачками  $t$  — случайная величина и  $\langle t \rangle = 2\tau$ , так как  $\tau$  характеризует выход в одном из двух направлений. Оценим скорость частицы как отношение длины прыжка  $2R$  ко времени  $t$  между прыжками  $v = 2R/t$ . Эта скорость уже усреднена по интервалу времени  $t$ , но остается случайной величиной, так как  $t$  — случайная величина. Для получения распределения по скоростям необходимо учесть распределение по различным временам ожидания  $t$  на интервале  $[t_{\text{out}}; \infty]$ :

$$\omega(t) = \frac{1}{2\tau} \exp\left(-\frac{t - t_{\text{out}}}{2\tau}\right).$$

Медленный выход из потенциальной ямы подчиняется экспоненциальному распределению по временам выхода, что соответствует постоянной вероятности выхода. Тем не менее эти времена не могут быть меньше  $t_{\text{out}}$  (4), характеризующего минимальное значение  $t$ . Отсюда стандартным преобразованием получаем

$$\omega(v) = \frac{R}{\tau v^2} \exp\left(-\frac{R}{\tau v} + \frac{t_{\text{out}}}{2\tau}\right).$$

Это распределение ограничено на интервале  $[0, 2R/t_{\text{out}}]$  и позволяет вычислить внешнюю эффективную темпе-

ратуру как среднюю кинетическую энергию двумерного движения  $\frac{kT_{\text{out}}}{2} = \frac{m\langle v^2 \rangle}{2}$ :

$$T_{\text{out}} = \frac{2mR^2}{kt_{\text{out}}\tau}. \tag{5}$$

Это соответствует как традициям теории газов связывать температуру с кинетической энергией хаотического движения, так и методам твердого тела вводить различные эффективные температуры, характеризующие соответствующие процессы (электронная, фононная температуры). Перепишем распределение для скоростей через температуру и малый безразмерный параметр  $x_0 = \frac{t_{\text{out}}}{2\tau} \ll 1$ :

$$\omega(v) = \frac{1}{v^2} \sqrt{\frac{kT_{\text{out}}x_0}{m}} \exp\left(-\frac{1}{v} \sqrt{\frac{kT_{\text{out}}x_0}{m}} + x_0\right). \tag{6}$$

Средняя скорость, необходимая для определения коэффициента диффузии, может быть представлена в следующих видах, согласно (4),

$$\langle v \rangle = -\sqrt{\frac{kT_{\text{out}}x_0}{m}} \ln x_0 = \frac{R}{\tau} \ln \frac{2\tau}{t_{\text{out}}} = -\frac{R}{\tau} \frac{\langle U \rangle}{kT}.$$

**1.5. Диффузия**

В общем виде коэффициент диффузии  $D$  в заданном направлении определяется через длины скачков из ямы в яму и среднюю скорость. Он связан с внешней эффективной температурой и коэффициентом затухания  $\eta$  соотношением Эйнштейна  $D = kT_{\text{out}}/(m\eta)$  [18]. Выражая  $D$  через температуру (5), получаем

$$D_x = \frac{2R\langle v \rangle}{2} = \frac{kT_{\text{out}}t_{\text{out}}}{2m} \ln \frac{2\tau}{t_{\text{out}}} = \frac{kT_{\text{out}}}{m\eta}. \tag{7}$$

Коэффициент затухания, зависящий от температуры и потенциального рельефа, выражается из (7). Определение внешней эффективной температуры и коэффициента затухания позволяет рассматривать движение частицы на масштабах много больших  $R$ , как обычную диффузию, описываемую уравнением Ланжевена или Фоккера–Планка.

**1.6. Энтропия**

Рассмотрим энтропию скорости как один из важнейших параметров процесса. Она характеризует неопределенность в скоростях частиц, находящихся на поверхности кластера. Вычисляя средний логарифм от (6), получаем зависимость энтропии от температуры

$$S = \frac{k}{2} \ln T_{\text{out}} + S(x_0).$$

Можно ввести условную энтропию  $S_c$ , характеризующую распределение по скоростям при условии, что скачок происходит. Тогда

$$S_c = \frac{k}{2} \ln T_c + S(x_0),$$

где условная температура равна кинетической энергии во время скачка  $T_c = \frac{m\langle v^2 \rangle_c}{k} = \frac{4mR^2}{kt_{\text{out}}^2}$ . Энтропия  $S_j$  самого

скачка определяется вероятностью скачка  $t_{out}/(2\tau)$  по формуле Шеннона

$$S_j = -\frac{k}{2} \ln(t_{out}/(2\tau)).$$

Очевидно, выполняется соотношение  $S_c = S - S_j$  [14].

Итак, мы получили возможность сопоставить основные термодинамические и статистические параметры по формулам, аналогичным выражениям для идеального газа, при том, что распределение по скоростям отлично от максвелловского. Все сказанное выше можно применить как к адатомам, так и к кластерам. Аналогично будет оцениваться температура и энтропия для больших скачков, связанных с движением островка.

Общий план описания диффузии броуновской частицы на заданной периодической поверхности состоит из нескольких этапов. Первый этап очень сложен, но позволяет получить внутреннюю температуру из решения системы интегральных уравнений (2). На втором этапе по полученным нами формулам находятся средние времена ожидания и прыжка, которые определяют внешнюю температуру. В итоге задача сводится к стандартной теории идеального газа, согласно которой определяются коэффициент диффузии и энтропия.

## 2. Влияние движения кластера на диффузию адатома на нем

### 2.1. Приближенные оценки основных величин

Соотношение, на котором основаны наши оценки,  $|\tilde{E}| \gg |U_{min}|$  следует из экспериментальных данных. А именно энергия активации кластера много больше, чем энергия активации для адатома даже в том случае, когда их массы одного порядка величины, т.е. кластер состоит из нескольких адатомов. Обозначим большими буквами или тильдами величины, описывающие движение кластера (островка), а маленькими — адатома. Тогда  $M, m$  — массы кластера и адатома,  $V$  и  $v$  — их скорости,  $\tilde{t}_{out}$  — характерное время движения (скачка) кластера, много меньше чем время между скачками  $\tilde{\tau}$ . Пренебрегая трением для кластера, получаем оценку для скорости движения во время скачка  $V \sim \sqrt{|\tilde{E}|/M}$  и соответственно для времени этого скачка  $\tilde{t}_{out} \sim R/V$ . Для кластеров вероятность скачка, так же определяемая энергией активации, много меньше, чем для адатомов  $1/\tilde{\tau} \ll 1/\tau$ . Таким образом мы имеем два процесса, в равной степени влияющих на диффузию адатома: относительно частые, но короткие переходы

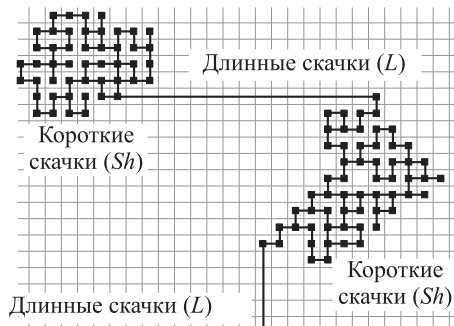


Рис. 4. Модель движения адатома на кластере в виде коротких (в соседнюю ячейку) и длинных скачков

в соседнюю ячейку и редкие, но характеризующиеся высокими энергиями, переходы, возникающие в результате диффузии кластера (рис. 4). При таком быстром выходе адатома форма потенциальной ямы  $U(r)$  и скорость его теплового движения не играют существенной роли. Из приведенных оценок получаем, что скорость выходящего из ямы адатома примерно равна скорости кластера  $V$  и много больше тепловых скоростей. А его кинетическая энергия в начале движения оценивается как  $E_0 \approx |\tilde{E}|m/M$ .

### 2.2. Распределение вероятностей для скорости адатома на кластере

Рассмотрим условные распределения по скоростям частиц, находящихся на поверхности кластера, и учтем переходы на большие расстояния в результате движения кластера. Если скачок адатома произошел, то он либо длинный с условной вероятностью  $P_l = \tau/\tilde{\tau}$ , либо короткий  $P_{sh} = 1 - \tau/\tilde{\tau}$ . Чтобы флуктуирующий кластер совершил скачок, его энергия должна быть больше энергии активации, и для вероятностей соответственно выполняется  $P_l \ll P_{sh}$ . При коротких переходах скорость мала по сравнению со скоростью длинных переходов:

$$\langle v \rangle^+ \sim \langle \langle v_{sh} \rangle \rangle \ll \langle \langle v_l \rangle \rangle \sim V.$$

Таким образом, эти две скорости можно характеризовать двумя дважды условными распределениями (рис. 5). Одно условие заключается в том, что скачок произошел, а другое в том, что он короткий для  $w(v_{sh})$  или длинный для  $w(v_l)$ . Область перекрытия распределений пренебрежимо мала. Пользуясь следствием теоремы Байеса для условной вероятности, получаем общее условное распределение по скоростям

$$w(v) = w(v_{sh})P_{sh} + w(v_l)P_l. \tag{8}$$

Каждое из этих распределений нормировано на единицу.

### 2.3. Диффузия под действием двух эффективных температур

В работе рассмотрены два основных механизма диффузии: малые, но частые скачки и большие, но редкие.

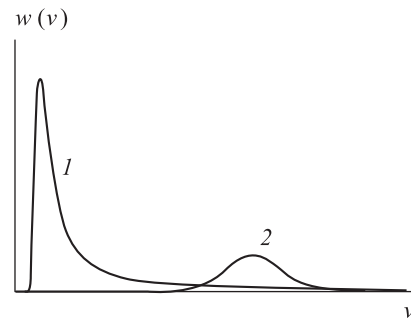


Рис. 5. Качественный вид распределения скоростей адатома. Большой пик соответствует коротким скачкам (6) (кривая 1), а малый — длинным (кривая 2)

Диффузия представляется суммой

$$D = \langle v \rangle R + \langle L \rangle \langle v \rangle, \quad (9)$$

где  $L$  — величина длинного скачка и  $\langle v \rangle$  — средняя скорость. Аналогично (7) можно коэффициент диффузии определить через эффективные внешние температуры.

#### 2.4. Условная энтропия при условии скачка

Для кластеров вероятность скачка  $\tilde{t}_{\text{out}}/(2\tilde{\tau})$  много меньше, чем для адатомов. Поэтому влияние движения кластера на движение адатома удобнее рассматривать с помощью условной энтропии, считая, что вероятность какого-либо скачка равна вероятности переходов в соседнее состояние  $t_{\text{out}}/(2\tau)$ , пренебрегая малой добавкой, связанной с движением кластера. Для расчета условной энтропии вычисляем средний логарифм от (8), учитывая, что область перекрытия распределений пренебрежимо мала:

$$S_c = \frac{kP_{\text{sh}}}{2} \ln T_{\text{sh}} + \frac{kP_l}{2} \ln T_l,$$

где условные температуры для каждого вида скачков определяются, как указано в разделе 1.4.

#### 2.5. Длинные скачки в результате ударов, создаваемых движением кластера

Для окончательного определения коэффициента диффузии найдем величину длинного скачка и среднюю скорость. Начальная энергия  $E_0$  адатома, выбитого силой инерции на вершине потенциального барьера, соответствует его кинетической энергии. Для описания движения частицы после удара и вычисления длины и времени ее пробега воспользуемся динамическим уравнением, аналогично тому, как это сделано в [19]:

$$\dot{v}_x = U'_p - \gamma v + \xi(t). \quad (10)$$

Массу считаем единичной ( $m = 1$ ). Изменение скорости определяется периодическим потенциалом  $U_p = \sum U(r + 2R)$ , диссипацией, с коэффициентом трения  $\gamma$  и случайными силами  $\xi(t)$ . Время прохождения одной ямы в зависимости от полной механической энергии частицы  $E$  оценивается как

$$t_w(E) = 2 \int_0^R \frac{dr_x}{\sqrt{2(E - U(r_x))}} \approx \frac{2R}{\langle v_x \rangle}. \quad (11)$$

Можно считать, что в процессе полета частицы через одну яму изменение энергии мало из-за того, что система является сильно неравновесной  $E \gg |U_{\text{min}}|$ . Тогда усредним (10) по координатам в пределах одной ямы, на интервале  $[-R; R]$ . Распределение по координатам для частицы, движущейся через потенциальную яму с механической энергией  $E$ , получаем из равномерного распределения по времени на интервале  $[0; t_w]$ :

$$w(r_x) = \frac{1}{t_w \sqrt{2(E - U(r_x))}}.$$

Это распределение четное, а функция  $U'$  — нечетная, в результате вклад первого слагаемого в усредненное (10) будет нулевым. Слагаемое с шумом обнуля-

ется. В результате в уравнении скорости, усредненной по яме, остается только слагаемое, описывающее диссипацию, и оно легко усредняется:

$$\langle \dot{v}_x \rangle \approx \frac{\Delta v}{t_w} \approx -\frac{2R\gamma}{t_w}. \quad (12)$$

Изменение скорости за проход через одну яму оказывается постоянным:

$$\Delta v = -\gamma 2R.$$

Тогда полное изменение скорости от начального до нулевого значения позволяет определить число пройденных ям:

$$v_{\text{out}} = \sqrt{2E_0} = -N\Delta v = N\gamma 2R.$$

Отсюда находим полный пробег частицы

$$L = 2NR = \frac{\sqrt{2E_0}}{\gamma}.$$

Средняя скорость, усредненная по всему пробегу, оценивается из уравнения (12) с учетом (11) как  $(2R/\gamma)/\ln(\sqrt{2E_0}/2R\gamma)$ , откуда получаем коэффициент диффузии, подставляя ее в (9).

#### Заключение

С точки зрения энергии, движение адатома на поверхности кластера идентично движению адатома на поверхности кристалла. В обоих случаях источником энергии является термостат, задаваемый тепловым движением атомов подложки. С точки зрения энтропии эти два случая имеют существенное различие. При движении адатома на поверхности кластера силовые импульсы со стороны термостата сортируются на два типа: приводящие к смещению кластера и не приводящие. То есть в систему записывается дополнительная информация, и энергия термостата структурируется следующим образом: тепловое блуждание адатома по кластеру соответствует меньшей температуре, чем реальная температура, определяющая диффузию на поверхности подложки. В то же время к этим смещениям на короткие дистанции добавляются большие скачки, вызванные смещениями самого кластера. В сумме это приводит к эффекту увеличения коэффициента диффузии или, более того, возникновению супердиффузии.

Движение частицы в равной мере определяется двумя факторами: температурой и потенциальным рельефом. Поэтому соотношения, полученные на основе модели идеального газа, связывающие температуру с энтропией и с коэффициентом диффузии, здесь не выполняются. Для удобства описания введены эффективные температуры, учитывающие структуру потенциальной энергии и характеризующие хаотическое движение адатома таким образом, что стандартные формулы для энтропии и коэффициента диффузии становятся удобно применимыми. Для каждого типа движения вводится своя эффективная температура.

#### Список литературы

1. Wang C., Ehrlich G. // Phys. Rev. Lett. 1993. **70**. P. 41.
2. Gölzhäuser A., Ehrlich G. // Phys. Rev. Lett. 1996. **77**. P. 1334.

3. Fu T.-Y., Chang Ch.-Ch., Tsong T.T. // J. Vac. Sci. Technol. 2002. **A20**, N 3. P. 897.
4. Kellogg G.L. // Phys. Rev. Lett. 1994. **73**. P. 1833.
5. Stepanyuk V.S., Tsioline D.V., Bazhanov D.I. et al. // Phys. Rev. B. 2001. **63**. P. 235406.
6. Kerner G., Horowitz Y., Asscher M. // J. Phys. Chem. B. 2005. **109**. P. 4545.
7. Luedtke W.D., Landman U. // Phys. Rev. Lett. 1999. **82**. P. 3835.
8. Levano N.A., Stepanyuk V.S., Hergert E. et al. // Phys Rev B. 2000. **61**. P. 2230.
9. Stepanyuk V.S., Hergert E., Bazhanov D.I., Kirschner J. // Phys Rev B. 2001. **63**. P. 153406.
10. Tang J., Xu M., Li X., Long W. // Chinese J. Chem. Phys. 2008.
11. Чичигина О.А. // Сб. науч. трудов памяти А.Н. Малахова / Под ред. А.И. Саичева. Нижний Новгород, 2000. С. 98.
12. Чичигина О.А., Нетребко А.В. // Изв. вузов. Прикл. нелин. динам. 2001. **9**. С. 85.
13. Чичигина О.А. // ЖЭТФ. 1999. **116**. С. 57.
14. Странтонович Р.Л. Теория Информации. М. 1975.
15. Kramers H.A. // Physica. 1940. **7**. P. 284.
16. Mel'nikov V.I. // Phys. Rev. 1991. **209**. P. 1.
17. Stratonovich R. Topics in the theory of random noise. Vol. 1. N. Y.; L., 1963.
18. Einstein A. Investigations of the theory of the brownian movement. N. Y., 1956.
19. Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H. et al. // Phys. Rev. E. 2004. **70**. P. 051104.

### Entropy effects influence on adatom surface diffusion

L. S. Bulushova<sup>a</sup>, O. A. Chichigina<sup>b</sup>

*Department of General Physics and Wave Processes, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*

*E-mail: <sup>a</sup>bul-lidia@yandex.ru, <sup>b</sup>chichigina@ilc.edu.ru.*

Slow adatom diffusion on periodical potential of forming upper layer of a crystal in growth is examined. Cluster motion is studied as diffusion accelerating factor resulting in entropy growth in comparison with formed stable layer. Diffusion coefficient, entropy and effective temperatures are obtained as base properties characterizing parameters.

*Keywords:* surface diffusion, effective temperature, Boltzman quasi-equilibrium distribution, Kramers time.

PACS: 05.04.-a, 05.70 Np, 68.35 Md, 68.43 Jk.

*Received 1 November 2009.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 2(2010).

### Сведения об авторах

1. Булушова Лидия Станиславовна — аспирант; тел.: (495) 939-26-12, e-mail: bul-lidia@yandex.ru.

2. Чичигина Ольга Александровна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-26-12, e-mail: chichigina@ilc.edu.ru.