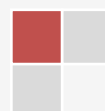




Роман Пелещак, Олег Кузик, Олеся Даньків

**РОЛЬ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНОЇ
ВЗАЄМОДІЇ В ФОРМУВАННІ
НАНОКЛАСТЕРІВ ПРИ ЛАЗЕРНОМУ
ОПРОМІНЕННІ GaAs, CdTe**

**Дрогобич
2018**



УДК 539.3+530.182+537.222.22
П 25

*Рекомендовано до друку вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка
(протокол № 17 від 20.12.2018 р.).*

Рецензенти:

- професор кафедри прикладної фізики і наноматеріалознавства Національного університету “Львівська політехніка”, доктор фізико-математичних наук **Лукіянець Богдан Антонович**;
- доцент кафедри фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, кандидат фізико-математичних наук **Гадзаман Іван Васильович**.

Роман Пелещак, Олег Кузик, Олеся Даньків.

Роль електрон-деформаційної взаємодії в формуванні нанокластерів при лазерному опроміненні GaAs, CdTe :
П 25 *монографія / Роман Пелещак, Олег Кузик, Олеся Даньків. – Дрогобич : Редакційно-видавничий відділ Дрогобицького державного педагогічного університету імені І. Франка, 2019. – 210 с.*

У монографії систематизовані результати наукових досліджень з проблеми впливу електрон-деформаційної взаємодії на умови формування нанокластерів при лазерному опроміненні. Монографія буде корисною для підготовки фахівців другого та третього рівнів вищої освіти спеціальностей “Фізика та астрономія” і “Прикладна фізика та наноматеріали”.

ЗМІСТ

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1. Просторовий перерозподіл міжвузлових атомів та вакансій у напівпровідниках під впливом імпульсного лазерного опромінення	11
1.1. Модель	11
1.2. Просторовий перерозподіл міжвузлових атомів та вакансій у Ge під впливом лазерного опромінення	14
1.3. Деформаційно-дифузійний розподіл точкових дефектів в об'ємних напівпровідниках і гетеросистемах	22
1.4. Взаємодія електронної підсистеми з точковими дефектами в об'ємних напівпровідниках та гетеросистемах	34
1.5. Висновки до розділу 1	44
РОЗДІЛ 2. Деформація ґратки та просторовий перерозподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах	46
2.1. Вступ.....	46
2.2. Модель самоузгоджених деформаційно-дифузійних явищ у напруженому епітаксійному шарі	48
2.3. Розрахунок параметра деформації та профілю розподілу точкових дефектів у напруженому епітаксійному шарі	52
2.4. Модель деформаційного перерозподілу домішок у тришарових гетеросистемах із напруженими шарами.....	59
2.5. Просторовий перерозподіл домішок у напруженій гетероструктурі GaAs/In _x Ga _{1-x} As/GaAs	63
2.6. Висновки до розділу 2	73
РОЗДІЛ 3. Нелінійна модель формування $n-n^+$ переходів у широкозонних напівпровідникових кристалах з точковими дефектами з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії	75
3.1. Вступ.....	75

3.2. Гамільтоніан кристалу із самоорганізованими ДД-структурами з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії	77
3.3. Розв'язання системи нелінійних диференціальних рівнянь для параметра деформації та концентрації дефектів.....	78
3.4. Формування $n-n^+$ переходів у напівпровідниках GaAs з самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами	83
3.5. Електрон-деформаційна складова параметра деформації в кристалі з самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами	94
3.6. Роль електрон-деформаційної взаємодії у формуванні $n-n^+$ переходів у імплантованій кристалічній матриці	99
3.7. Висновки до розділу 3	108

РОЗДІЛ 4. Самоорганізований дифузійно-деформаційний розподіл точкових дефектів та електронів у напружених гетеросистемах ... 110

4.1. Вступ.....	110
4.2. Нелінійна модель дифузійно-деформаційного розподілу точкових дефектів у тришаровій гетеросистемі	112
4.3. Розв'язок самоузгодженої системи рівнянь для дифузії дефектів та деформації гетероструктури	115
4.4. Просторовий перерозподіл точкових дефектів та деформація матеріалу в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs	117
4.5. Вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування $n-n^+$ переходів у тришарових гетеро структурах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами.....	130
4.6. Висновки до розділу 4	143

РОЗДІЛ 5. Роль акустoeлектронної взаємодії у формуванні поверхневої надгратки адатомів 145

5.1. Вступ.....	145
5.2. Деформація на поверхні напівпровідника з врахуванням акустoeлектронної взаємодії	146
5.3. Формування періодичної структури заряджених адатомів	149

5.4. Формування періодичної структури нейтральних адатомів	156
5.5. Висновки до розділу 5	157
РОЗДІЛ 6. Вплив всебічного тиску на формування поверхневої надгратки адатомів	159
6.1. Вступ.....	159
6.2. Модель впливу всебічного тиску на формування надгратки адатомів під дією лазерного опромінення	160
6.3. Формування нанометрової структури адатомів у нелегованому напівпровіднику при дії всебічного тиску.....	163
6.4. Формування нанометрової структури адатомів у легованому напівпровіднику <i>n</i> -типу при дії всебічного тиску	169
6.5. Вплив гідростатичного тиску на температуру формування поверхневої надгратки адатомів	175
6.6. Висновки до розділу 6	176
РОЗДІЛ 7. Вплив електричного поля на нуклеацію нанометрової періодичної структури адатомів у напівпровіднику GaAs під впливом лазерного опромінення	177
7.1. Вступ.....	177
7.2. Модель нуклеації нанометрової структури при дії електричного поля	178
7.3. Формування поверхневої надгратки в GaAs при дії електричного поля	184
7.4. Висновки до розділу 7	191
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	192

ВСТУП

Реальні напівпровідникові кристали та напружені гетеросистеми (InAs/GaAs, CdTe/ZnTe) при температурах $T > 0$ містять певне число точкових дефектів. Додаткові дефекти генеруються під впливом зовнішніх факторів: нагрівання, деформації, опромінення частинками і ін. Вказаний вплив може здійснюватися цілеспрямовано на певних етапах технологічного циклу створення напівпровідникового приладу (опромінення [1, 2], введення домішкових атомів [3-6], керування співвідношенням потоків компонент сполук у процесі епітаксійного росту [3, 7, 8]) або бути небажаним, наприклад, при роботі в умовах підвищеної радіації. Взаємодія точкових дефектів із самоузгодженим полем деформації, яке може виникати як за рахунок наявності цих дефектів, так і неоднорідності кристалічної системи (наприклад, гетеромежа), призводить до просторового перерозподілу дефектів і, при певних умовах, до утворення самоорганізованих дефектно-деформаційних структур [9] (кластерів і періодичних структур).

Лазерно-індуковані періодичні поверхневі наноструктури можуть генеруватися практично на будь-якому матеріалі (метали, напівпровідники, діелектрики) при опроміненні лінійно поляризованим випромінюванням і формуються у величезному діапазоні інтервалів імпульсів, починаючи від неперервного хвильового опромінення до декількох фемтосекунд [10 – 16]. У експериментальній роботі [12] показано, що їх утворення відбувається при нагріванні до температури більшої за температуру плавлення і зумовлене ефектом далекодії лазерного імпульсу та пояснюється впливом градієнта тиску поверхневої акустичної хвилі. У роботах [11, 13] під впливом імпульсного лазерного опромінення напівпровідників Ge, Si та їх твердих розчинів отримано наноструктуровану поверхню при її нагріванні до температури, меншої за температуру плавлення. Автори цих робіт розробили якісну модель, яка пояснює формування поверхневих наноструктур за рахунок виникнення градієнта

температури i , відповідно, дифузійних потоків міжвузлових атомів та вакансій в неоднорідному деформаційному полі. Причому, міжвузлові атоми накопичуються біля поверхні опроміненого зразка, формуючи поверхневу надгратку, а вакансії – вглибині напівпровідника.

У роботах [17, 18] показано, що у твердих тілах під впливом імпульсного лазерного опромінення з інтенсивністю більшою за деяке критичне значення, формуються нанопори. Зокрема, у роботі [17] встановлено умови лазерного формування нанопористих структур розміром від 40 до 50 нм і показано, що такі самоорганізовані структури (кластери вакансій) є більш однорідними на відстані кілька $\mu\text{м}$ від опроміненої поверхні.

Таким чином, для оптимізації технологічного процесу формування лазерно-індукованих напівпровідникових наноструктур та прогнозованого керування їх фізичними параметрами важливою є інформація про просторовий перерозподіл точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) під впливом лазерного опромінення.

У роботі [19] проведено в лінійному наближенні теоретичне дослідження перерозподілу дефектів з врахуванням їх ненульового об'єму на основі стаціонарного рівняння дифузії. Запропоновано модель “деформаційного втягування”, в основу якої покладено потік дефектів, модифікований деформаційними ефектами. У цій же роботі показано, що деформаційний потік протидіє дифузійному i , за певних умов, може його перевищувати. Однак, дана модель не враховує ефекти обумовлені нелокальною взаємодією між дефектами та атомами матриці. У роботах [20 – 22] розвинуто теорію спонтанної нуклеації поверхневої нанометрової ґратки, яка обумовлена нестійкістю у системі адатомів, що взаємодіють із самоузгодженою поверхневою акустичною хвилею. У межах даної теорії, яка враховує нелокальну взаємодію між дефектами та атомами матриці та акустoeлектронну взаємодію [20, 22], встановлено умови формування нанокластерів на поверхні твердих тіл і визначено періоди нанометрової ґратки як функції концентрації адатомів, електронів провідності та температури. Однак автори робіт

[19–22] не беруть до уваги, що під дією лазерного опромінення виникають градієнти деформації за рахунок неоднорідного нагрівання матеріалу з віддаленням від його опромінюваної поверхні. А цей фактор, як видно з аналізу експериментальних робіт [11, 13], досить часто є визначальним у формуванні поверхневих наноструктур. У роботі [23] розроблено модель дифузії у напружених твердих тілах при наявності градієнта температури, Але дана теорія не враховує деформації, які обумовлені самими дефектами і, які відіграють важливу роль у їх просторовому перерозподілі [19–22, 24, 25].

На умови формування самоорганізованих нанокластерів суттєво впливають деформаційні ефекти, обумовлені ненульовим об'ємом власних дефектів та домішок [24], акустоелектронною взаємодією [20, 22], невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів [26], а також зовнішніми чинниками, наприклад, впливом електричного [27, 28], магнітного поля [29] чи ультразвукової хвилі [30–33].

У роботах [9, 21] розвинуто теорію спонтанної нуклеації поверхневої нанометрової ґратки, яка обумовлена нестійкістю у системі адатомів, що взаємодіють із самоузгодженою поверхневою акустичною хвилею (ПАХ). У межах даної теорії встановлено умови формування нанокластерів на поверхні твердих тіл та визначено періоди нанометрової ґратки як функції концентрації адатомів та температури і показано, що їх формування є можливим тільки при низьких температурах. У роботах [20, 22] показано, що збільшення ступеня легування напівпровідника розширює температурні інтервали, в яких можливе формування періодичних дефектних структур.

У гетероепітаксійних системах з незначною невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів режим росту нанокластерів визначається тільки співвідношенням енергій двох поверхонь і енергії межі розділу. Якщо сума поверхневої енергії нарощуваного шару і енергії межі розділу менша від енергії поверхні підкладки, тобто якщо нарощуваний матеріал змочує підкладку, то виникає режим росту

Франка-ван дер Мерве [34]. У гетероепітаксійних системах за наявності значної невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів ($> 4\%$) процес формування нанокластерів здійснюється у два етапи відповідно до методу Странського-Крастанова [34]. На першому етапі відбувається ріст псевдоморфного напруженого шару (наприклад, InAs на підкладці GaAs). При досягненні ним критичної товщини (1.5-1.7 моношару (МШ)) настає другий етап – спонтанний розпад псевдоморфного шару на систему кристалічних острівців і змочуючий шар товщиною ~ 1 МШ. Такий розпад зумовлений релаксацією пружних напружень, що виникають у гетероепітаксійній системі за неузгодження параметрів ґраток $\left(f = \frac{a^{\text{InAs}} - a^{\text{GaAs}}}{a^{\text{InAs}}} \approx 7\% \right)$, і різними коефіцієнтами термічного розширення підкладки GaAs та епітаксійного шару InAs.

Тому, очевидно, що дія зовнішніх пружних полів впливатиме на умови формування нанокластерів [35 – 37]. Зокрема, в роботі [35] представлено результати експериментальних досліджень зовнішнього впливу механічної деформації на умови формування квантових точок.

У даній роботі розроблено модель нуклеації нанометрової структури адатомів при дії всебічного тиску і електричного поля та в межах запропонованої моделі проаналізовано можливість розширення температурного діапазону, в якому формуються нанокластери.

Дослідження самоузгодженням чином морфологічної та електронної структури опромінених напівпровідникових матеріалів із самоорганізованими точковими дефектами є важливим для створення мікро- і нанооптоелектронних приладів (датчиків іонізованого випромінювання та резонансних тунельних діодів). Знаючи закономірності самоузгодженої зміни просторового розподілу самоорганізованих точкових дефектів, електронів та деформації кристалічної ґратки, можна прогнозовано керувати параметрами цих приладів. Зокрема, інформація про самоузгоджений просторовий

перерозподіл точкових дефектів, електронів та параметра деформації кристалічної ґратки в напівпровідникових матеріалах є необхідною для розуміння проблем їх стійкості та деградації нанооптоелектронних приладів, що працюють в умовах інтенсивного опромінення.

На сьогодні теоретичні дослідження самоузгодженого просторового перерозподілу точкових дефектів, деформації кристалічної ґратки та формування самоорганізованих дефектно-деформаційних структур були проведені в роботі [9] в межах пружного континууму без врахування електрон-деформаційної взаємодії, яка є суттєвою в напівпровідникових кристалах і в напружених гетеросистемах з високим ступенем заповнення зони провідності.

Завдяки високій рухливості носіїв заряду, широке використання при виробництві квантово-розмірних структур та височастотних лазерів на їх основі знайшов арсенід галію. Значна увага дослідників приділяється лазерній модифікації морфології приповерхневих шарів GaAs та CdTe, при якій умови формування нанокластерів є керованим процесом [15, 38]. Окрім цього, GaAs та CdTe мають одну з найбільших констант деформаційного потенціалу зони провідності (більша тільки в Ge), що робить зонну провідності та електронну підсистему чутливими до деформації. Тому очікуваним є те, що суттєвою буде взаємодія електричного поля із періодичною деформацією.

Тому теоретичні дослідження самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів в GaAs та CdTe є актуальними і представляють як науковий, так і практичний інтерес у плані створення *p-n*-структур на базі об'ємних напівпровідникових матеріалів і напружених гетеросистем із самоорганізованими нанокластерами.

РОЗДІЛ 1. Просторовий перерозподіл міжвузлових атомів та вакансій у напівпровідниках під впливом імпульсного лазерного опромінення

1.1. Модель

Розглянемо напівпровідник, поверхня якого піддається імпульсному лазерному опроміненню (рис. 1.1, а). Під дією лазерного опромінення в приповерхневому шарі генеруються точкові дефекти (міжвузлові атоми та вакансії) із середньою концентрацією $N_0 = G_d \tau_d$ (G_d – швидкість генерації дефектів; τ_d – час життя дефекта). Також спостерігається неоднорідне нагрівання матриці вглибину кристалу (рис. 1.1, b).

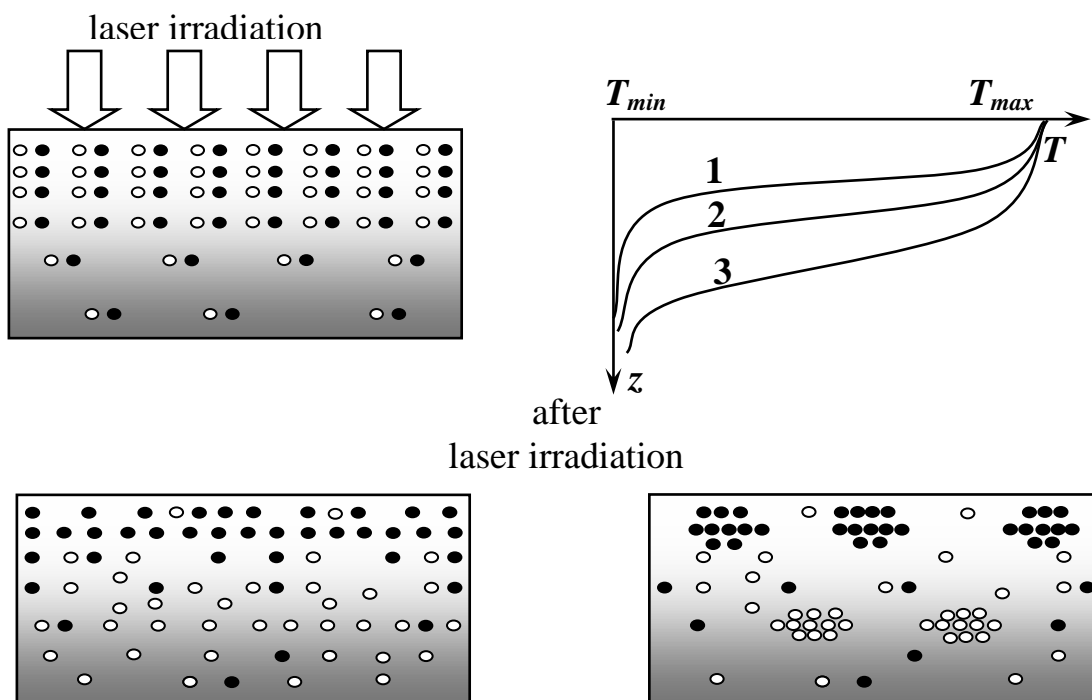


Рис. 1.1. Модель приповерхневого шару напівпровідника, що піддається лазерному опроміненню

У роботах [39, 40] досліджено просторовий розподіл температури у твердих тілах при їх опроміненні фемтосекундним лазером. Такий розподіл добре апроксимується функцією.

$$T(z) = (T_{\max} - T_{\min})e^{-z^2/l_T^2}, \quad (1.1)$$

де T_{\max} , T_{\min} – температура опромінюваної поверхні (визначається інтенсивністю лазерного опромінення) та температура підкладки (як правило в експерименті це кімнатна температура), відповідно; l_T – характерна відстань дії лазерного променя, яка при сталій інтенсивності визначається частотою лазерного імпульсу (криві 1, 2, 3 на рис. 1.1, b) [39].

За рахунок неоднорідного нагріву напівпровідника виникає неоднорідне деформаційне поле, яке створює деформаційно-дифузійні потоки дефектів. Причому дефекти, які є центрами розтягу (міжвузлові атоми), рухаються в область відносного розтягу (до поверхні кристалу), дефекти, які є центрами стиску (вакансії) – у протилежному напрямку [24] (рис. 1.1, c).

За рахунок такого перерозподілу біля поверхні кристалу зростає концентрація міжвузлових атомів, а на певній відстані від поверхні – вакансій. У роботах [28, 31] показано, що в таких дефектно-деформаційних системах при перевищенні концентрації дефектів деякого критичного значення $N_{ci} = \frac{E \cdot k_B T}{\theta_i^2}$ (E – модуль Юнга, k_B – стала

Больцмана, $\theta_i = K\Delta\Omega_i$ – деформаційний потенціал дефектів, K – модуль всебічного стиску, $i = 1$ – міжвузлові атоми, 2 – вакансії), за рахунок нелінійної взаємодії формуються окремі кластери дефектів та їх періодичні утворення (рис. 1.1, d). Встановимо умови, при яких є можливим формування самоорганізованих дефектно-деформаційних структур.

Потік дефектів у деформаційному полі з врахуванням нелокальної взаємодії між дефектами та атомами матриці має вигляд [31, 41]

$$j_i = -D_i \frac{dN_i}{dz} + N_i \frac{D_i \theta_i}{k_B T} \left(\frac{d\varepsilon}{dz} + \frac{d^3 \varepsilon}{dz^3} r_{da}^2 \right), \quad (1.2)$$

де D_i – коефіцієнт дифузії, ε – деформація, r_{da} – характеристична відстань взаємодії дефектів з атомами матриці.

Враховуючи, що деформація визначається двома факторами – дефектами та тепловим розширенням, потік дефектів можна записати у вигляді

$$j_i = -D_i \frac{dN_i}{dz} + N_i \frac{D_i \theta_i}{k_B T} \left(\sum_i \frac{\theta_i}{K} \left(\frac{dN_i}{dz} + \frac{d^3 N_i}{dz^3} r_{da}^2 \right) + \alpha \left(\frac{dT}{dz} + \frac{d^3 T}{dz^3} r_{da}^2 \right) \right), \quad (1.3)$$

де α – температурний коефіцієнт об’ємного розширення. Другий доданок – це потік дефектів у неоднорідному деформаційному полі, створеному самими дефектами. Тут враховано, що $\varepsilon = \sum_i \frac{\theta_i}{K} N_i$. Третій доданок – це потік дефектів у неоднорідному деформаційному полі, що виникає за рахунок наявності градієнта температури.

Тоді стаціонарне рівняння дифузії прийме вигляд

$$\frac{d}{dz} \left(D_i \frac{dN_i}{dz} - \frac{N_i D_i \theta_i}{k_B T} \left(\sum_i \frac{\theta_i}{K} \left(\frac{dN_i}{dz} + \frac{d^3 N_i}{dz^3} r_{da}^2 \right) + \alpha \left(\frac{dT}{dz} + \frac{d^3 T}{dz^3} r_{da}^2 \right) \right) \right) + v \frac{dN_i}{dz} = 0. \quad (1.4)$$

Останній доданок виражає той факт, що поверхня напівпровідника зсувається з швидкістю v за рахунок виходу міжвузлових атомів на поверхню [19].

Врахувавши, що деформаційний потенціал для вакансій набагато менший, ніж для міжвузлових атомів ($\theta_2 \ll \theta_1$), систему рівнянь (1.4) можна записати у вигляді

$$\frac{d}{dz} \left(D_1 \frac{dN_1}{dz} - \frac{N_1 D_1 \theta_1}{k_B T} \left(\frac{\theta_1}{K} \left(\frac{dN_1}{dz} + \frac{d^3 N_1}{dz^3} r_{da}^2 \right) + \alpha \left(\frac{dT}{dz} + \frac{d^3 T}{dz^3} r_{da}^2 \right) \right) \right) + v \frac{dN_1}{dz} = 0, \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(D_2 \frac{\partial N_2}{\partial z} - \frac{N_2 D_2 \theta_2}{k_B T} \left(\frac{\theta_1}{K} \left(\frac{\partial N_1}{\partial z} + \frac{\partial^3 N_1}{\partial z^3} r_{da}^2 \right) + \alpha \left(\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial^3 T}{\partial z^3} r_{da}^2 \right) \right) \right) + v \frac{\partial N_2}{\partial z} = 0, \quad (1.6)$$

Проінтегрувавши рівняння (1.5) та (1.6) з врахуванням того, що $\frac{dN_i(z \rightarrow \infty)}{dz} = 0$, отримаємо

$$N_i(z) = C_i T^{b_i} \exp \left(\int \left(\frac{T_{\min}}{TN_{bi}} \left(\frac{dN_1(z)}{dz} + \frac{d^3 N_1(z)}{dz^3} r_{da}^2 \right) + b_i \frac{d^3 T(z)}{dz^3} r_{da}^2 - \frac{\nu}{D_i(z)} \right) dz \right), \quad (1.7)$$

де $b_i = \frac{\alpha \theta_i}{k_B}$, $N_{ci} = \frac{K \cdot k_B T_{\min}}{\theta_i \theta_1}$ сталі інтегрування визначаються з умови збереження числа дефектів

$$\int_0^{\infty} (N_i - N_{0i}) dz = 0, \quad (1.8)$$

Рівняння (1.7) для концентрації міжвузлових атомів N_1 розв'язувалось методом послідовних наближень, де в правій частині за нульове наближення $N_1(z)$ приймався розв'язок $N_1^{(0)}(z)$ без врахування першого доданку підінтегральної функції (без врахування деформації обумовленої дефектами):

$$N_1^0(z) = C_1 T(z)^{b_i} \exp \left(\int \left(b_1 \frac{d^3 T(z)}{dz^3} r_{da}^2 - \frac{\nu}{D_1(z)} \right) dz \right).$$

1.2. Просторовий перерозподіл міжвузлових атомів та вакансій у Ge під впливом лазерного опромінення

Розрахунки просторового перерозподілу концентрації міжвузлових атомів та вакансій проводились для напівпровідника Ge при наступних значеннях параметрів:

1) коефіцієнт самодифузії германію: $D_i = 25,4 \exp(-3,13 eV / k_B T) \text{ cm}^2/\text{s}$ [42];

2) температурний коефіцієнт об'ємного розширення германію [43]:

T, K	100	200	300	400	500	600	800	1000	1200
$\alpha, 10^{-5} K^{-1}$	0,66	1,5	1,77	1,917	2,046	2,16	2,364	2,553	2,553

- 3) модуль всебічного стиску $K = \frac{c_{11} + c_{12}}{3} = 0,77 \text{ Mbar}$, де c_{11} , c_{12} – пружні сталі [44];
- 4) деформаційні потенціали: $\theta_1 = 15 \text{ eV}$; $\theta_2 = -7 \text{ eV}$; швидкість зсуву поверхні $v = 0,1 \text{ nm/s}$ [19].

На рис. 1.2, 1.3 приведено просторовий розподіл міжвузлових атомів та вакансій при різних значеннях їх середньої концентрації та характеристичної відстані взаємодії дефектів з атомами матриці при $T_{max} = 1200 \text{ K}$, $T_{min} = 300 \text{ K}$, $l_T = 5 \text{ nm}$. Критична концентрація (штрихова лінія), при перевищенні якої відбуваються процеси самоорганізації дефектів, розраховувалась за формулою [28, 31]

$$N_{ci} = \frac{E \cdot k_B T}{\theta_i^2}. \quad (1.9)$$

Як бачимо з рис. 1.2, міжвузлові атоми накопичуються біля опромінюваної поверхні (до 6 nm). Причому при середній концентрації міжвузлових атомів $N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (рис. 1.2, а), їх концентрація перевищує критичне значення тільки в приповерхневому шарі товщиною $\sim 2 \text{ nm}$ (при $r_d = 0$), або в шарі $(4 - 6) \text{ nm}$ від опромінюваної поверхні (при $r_d \geq 9 \text{ nm}$). В цих областях напівпровідникової підкладки при даних умовах можуть формуватися поверхневі дефектно-деформаційні структури міжвузлових атомів. Параметр r_d залежить від кристалічної структури, концентрації дефектів та температури і може бути визначений із умови мінімуму вільної енергії дефектної системи [28]. При збільшенні концентрації міжвузлових атомів (збільшенні інтенсивності лазерного опромінення, рис. 1.2, б) поверхневі наноструктури міжвузлових атомів можуть формуватися в приповерхневому шарі товщиною $\sim 6 \text{ nm}$ при будь-яких значення параметра r_d .

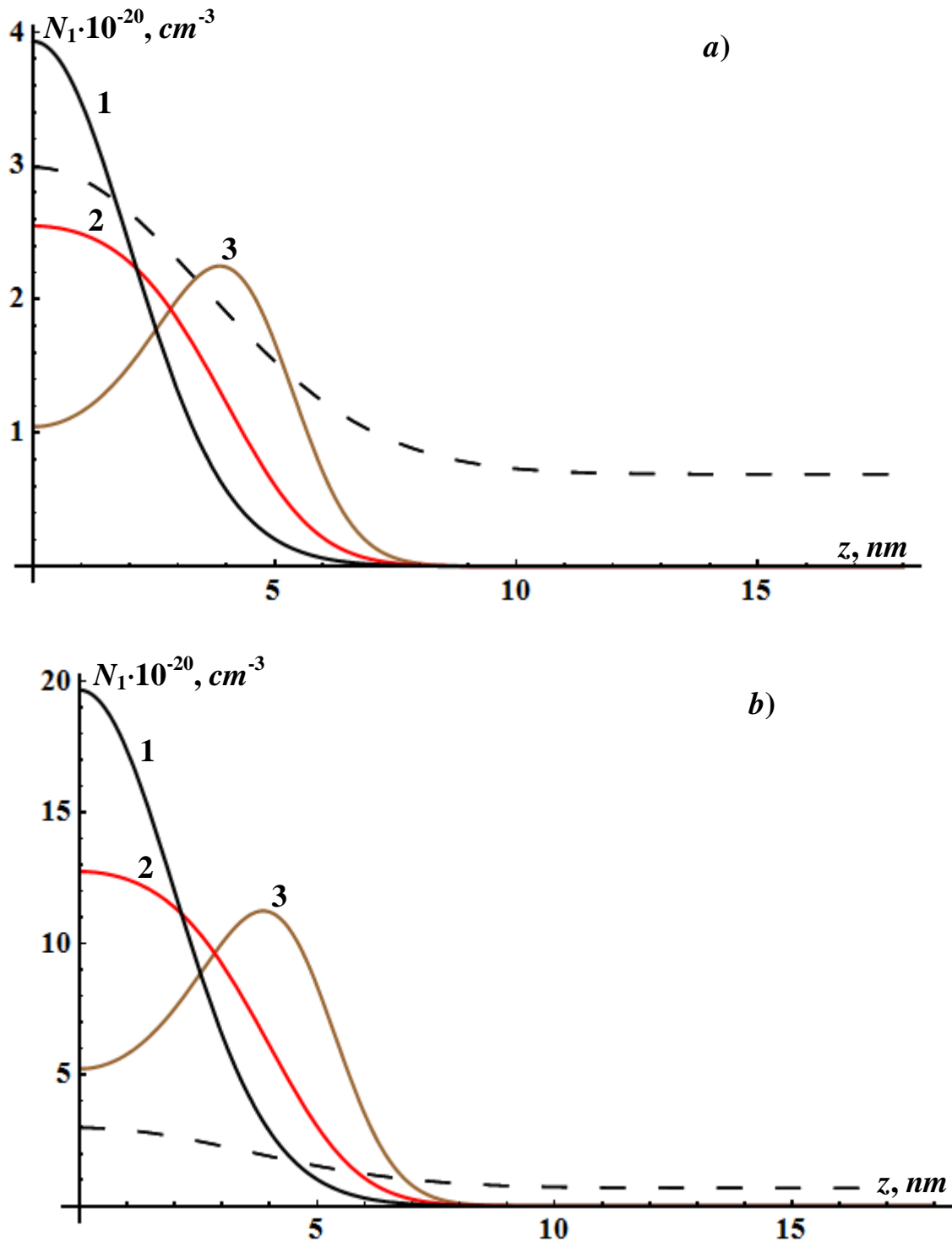


Рис. 1.2. Просторовий розподіл міжвузлових атомів при різних значеннях їх середньої концентрації та характеристичної відстані взаємодії дефектів з атомами матриці: 1 – $r_d = 0$; 2 – $r_d = 4 \text{ nm}$; 3 – $r_d = 9 \text{ nm}$;

a) $N_0 = 10^{19} \text{cm}^{-3}$; b) $N_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$

Штрихова лінія на всіх рисунках – критична концентрація дефектів

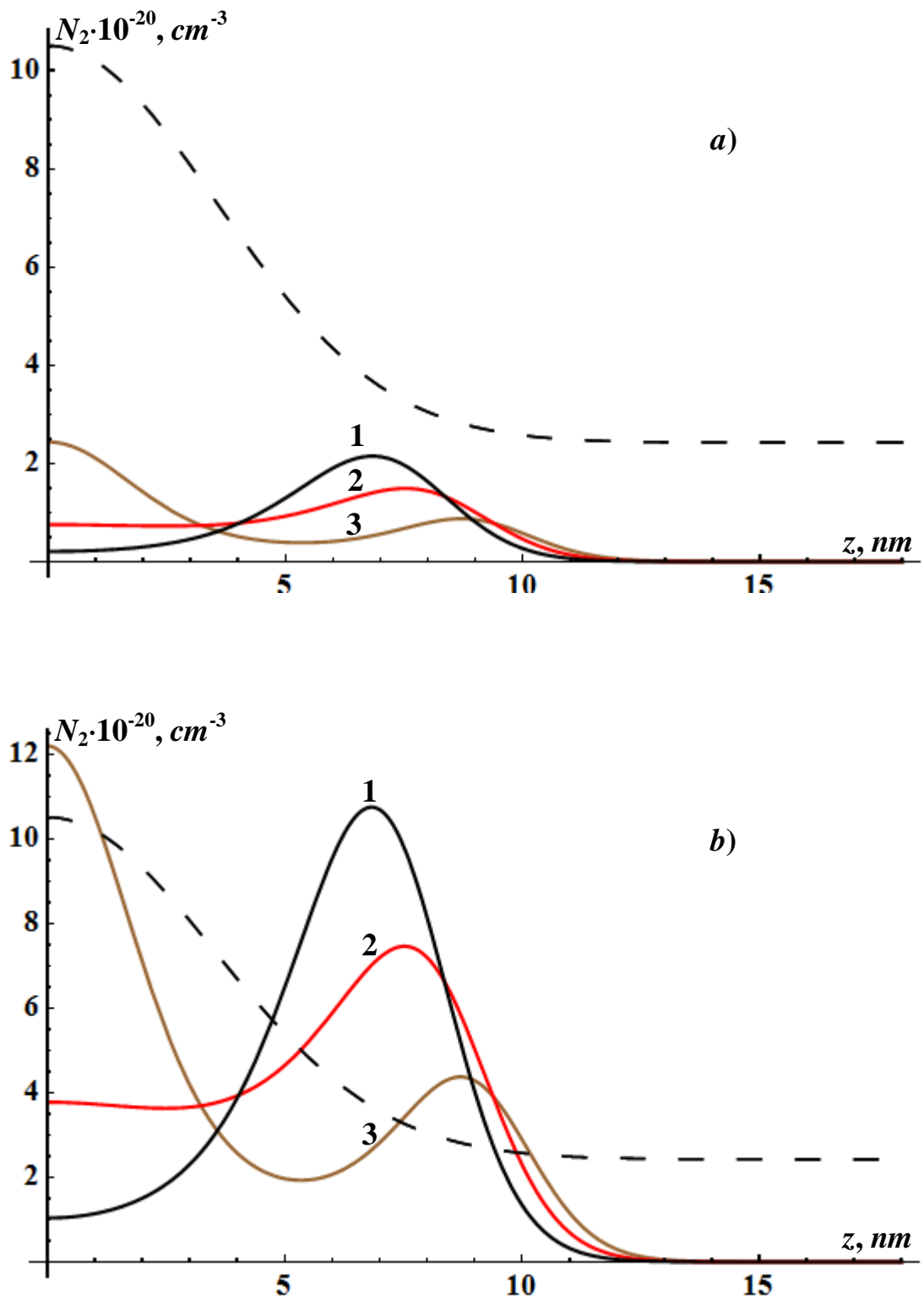


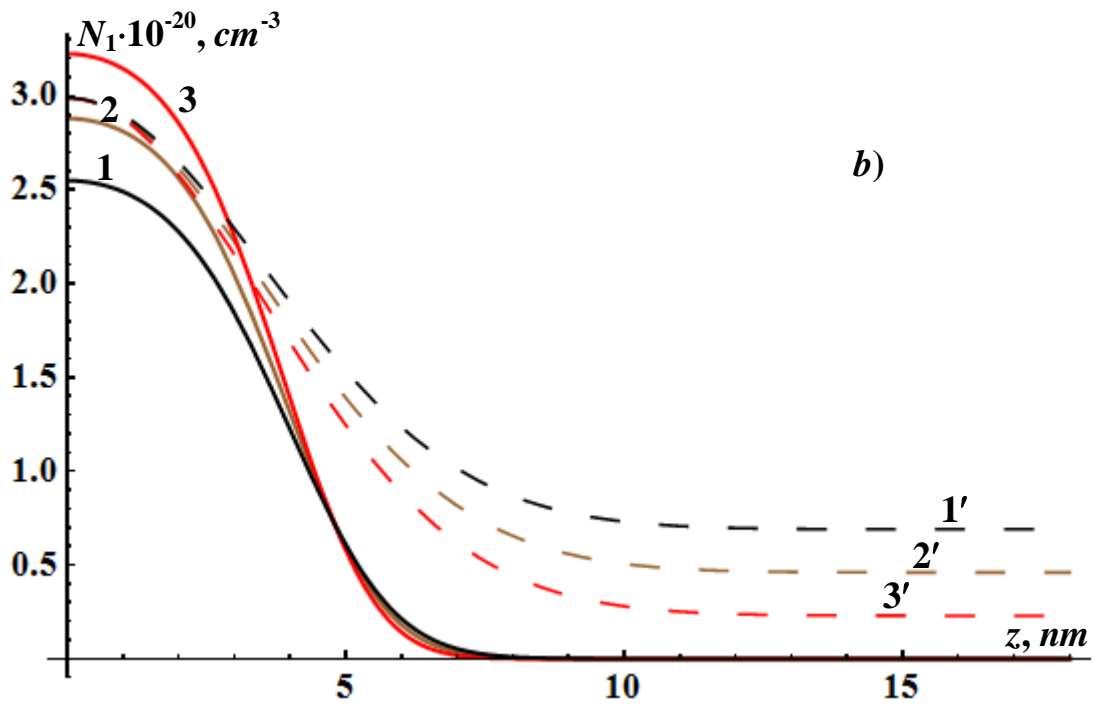
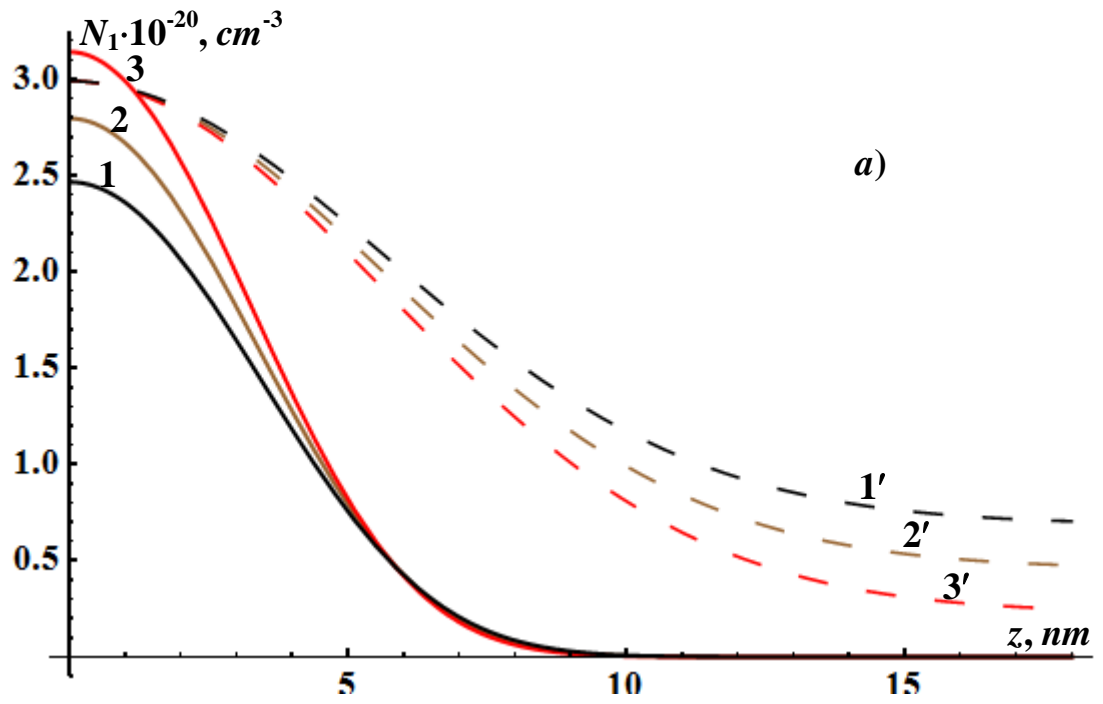
Рис. 1.3. Просторовий розподіл вакансій атомів при різних значеннях їх середньої концентрації та характеристичної відстані взаємодії дефектів

з атомами матриці: 1 – $r_d = 0$; 2 – $r_d = 4 \text{ nm}$; 3 – $r_d = 9 \text{ nm}$;

a) $N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$; b) $N_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Як бачимо з рис. 1.3, вакансії за рахунок деформаційних потоків віддаляються від опромінюваної поверхні і накопичуються на відстані $(6 - 10) \text{ nm}$. Хоча у випадку сильної нелокальної взаємодії (при $r_d \geq 9 \text{ nm}$) вакансії також можуть накопичуватись і біля поверхні підкладки (крива 3, рис. 1.3). При меншій інтенсивності лазерного опромінення ($N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, рис. 3, а) формування самоорганізованих наноструктур вакансій є неможливим. При збільшенні інтенсивності лазерного опромінення ($N_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, рис. 1.3, б) на відстані $(5 - 10) \text{ nm}$ концентрація вакансій перевищує критичне значення, що призводить до формування їх самоорганізованих структур, наприклад пор. Ці результати добре узгоджуються із експериментальними результатами роботи [11, 13].

На рис. 1.4, 1.5 приведено просторовий розподіл міжвузлових атомів та вакансій при різних значеннях температури підкладки та характерної відстані дії лазерного променя при середній концентрації дефектів $N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ та при $r_d = 4 \text{ nm}$. При великій характерній відстані дії лазерного променя (рис. 1.4, а, б) концентрація міжвузлових атомів перевищує критичне значення біля поверхні напівпровідника і тільки при низькій температурі підкладки (крива 3, рис. 1.4, а, б). При зменшенні характерної відстані дії лазерного променя l_T (визначається тривалістю лазерного імпульсу) приповерхнева область, де можливі самоорганізаційні процеси, спочатку розширюється, а при $l_T < 4 \text{ nm}$ зміщується від поверхні (рис. 1.4, с). У цьому випадку формування нанокластерів можливе при будь-якій температурі підкладки на відстані $(2 - 4) \text{ nm}$ від поверхні.



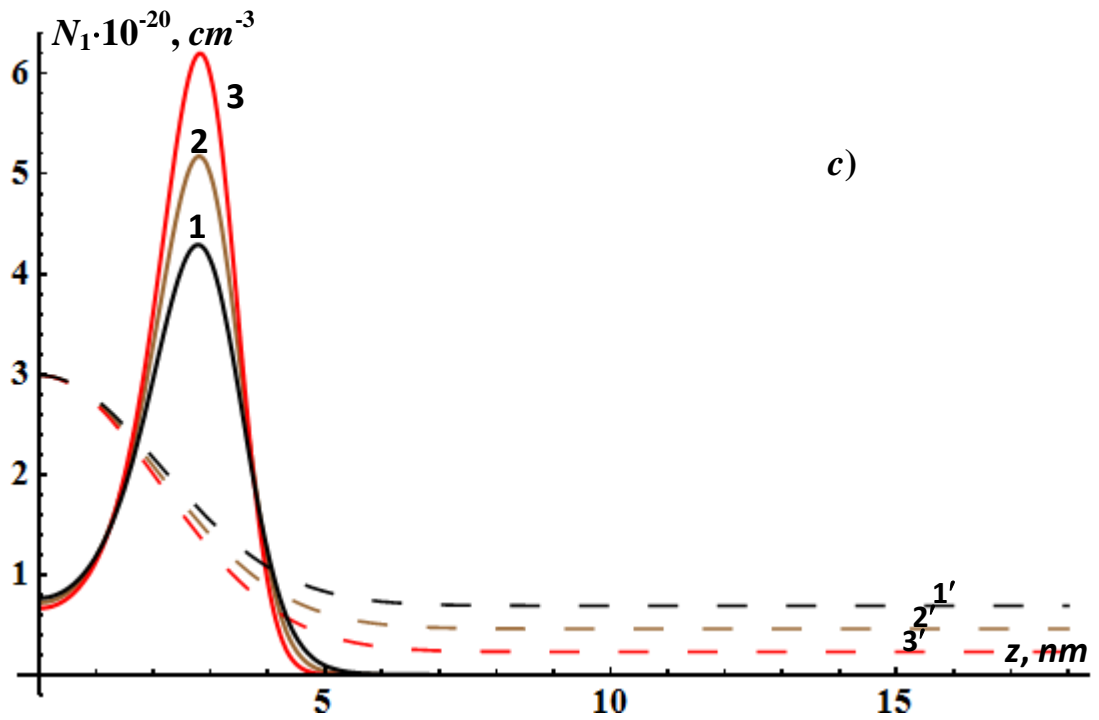
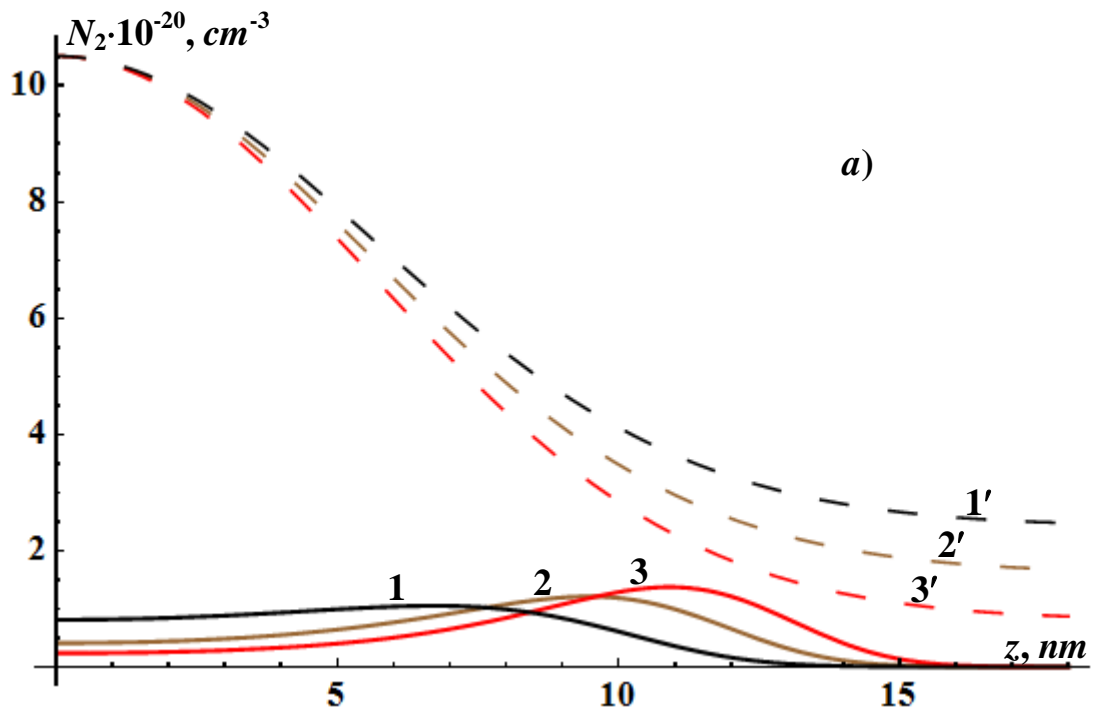


Рис. 1.4. Просторовий розподіл міжвузлових атомів ($N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) при різних значеннях характерної відстані дії лазерного променя та температури підкладки: 1 – $T_{\min} = 300 \text{ K}$; 2 – $T_{\min} = 200 \text{ K}$; 3 – $T_{\min} = 100 \text{ K}$
 a) $l_T = 8 \text{ nm}$; b) $l_T = 5 \text{ nm}$; c) $l_T = 3 \text{ nm}$



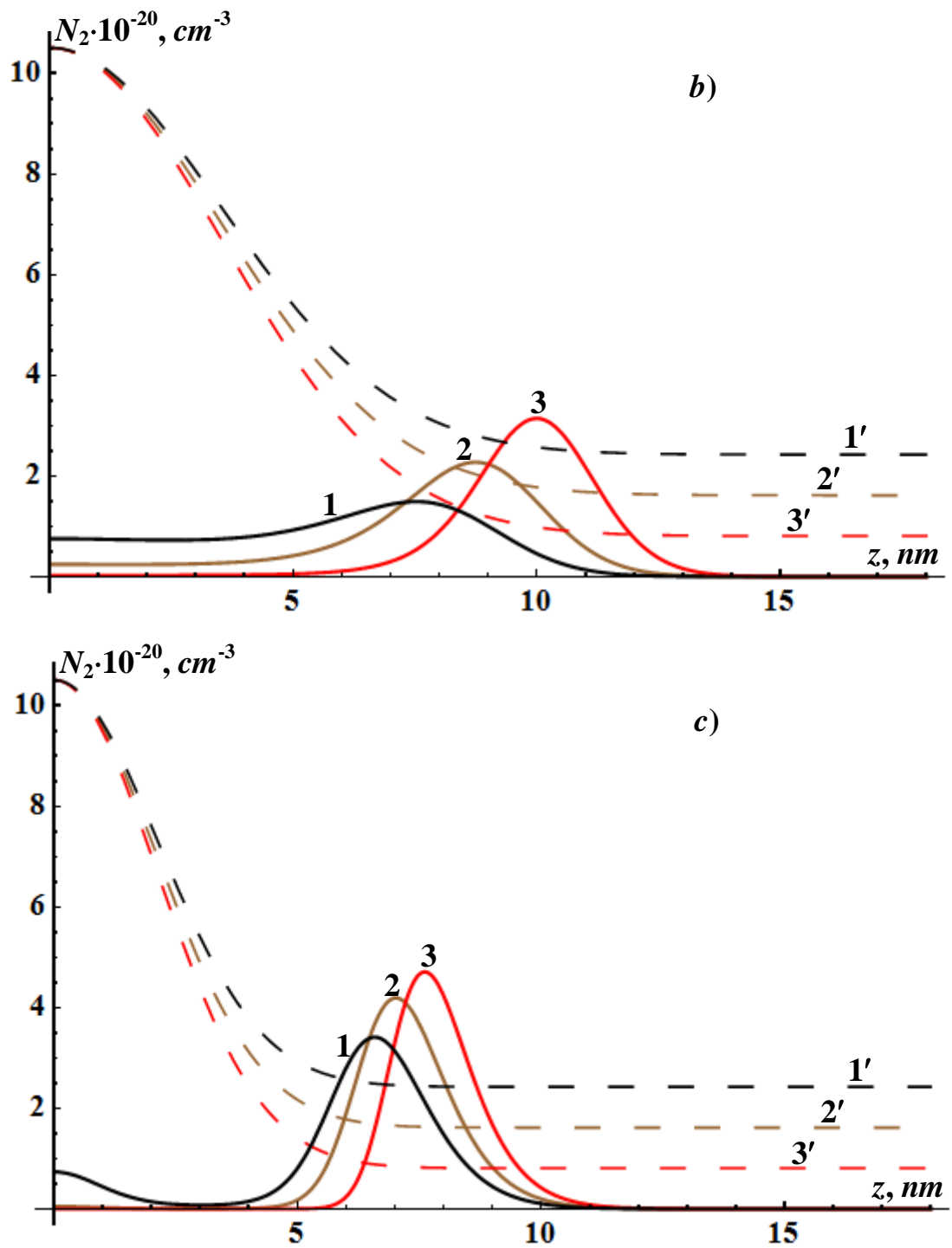


Рис. 1.5. Просторовий розподіл вакансій ($N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) при різних значеннях характерної відстані дії лазерного променя та температури підкладки:

1 – $T_{\min} = 300 \text{ K}$; 2 – $T_{\min} = 200 \text{ K}$; 3 – $T_{\min} = 100 \text{ K}$

a) $l_T = 8 \text{ nm}$; b) $l_T = 5 \text{ nm}$; c) $l_T = 3 \text{ nm}$;

У випадку вакансій (рис. 1.5) залежно від характерної відстані дії лазерного променя дефекти накопичуються на відстані (5 – 15) *nm* від опромінюваної поверхні. Однак при $l_T > 7 \text{ nm}$ (рис. 1.5, а) процеси самоорганізації вакансій неможливі при будь-якій температурі. При зменшенні характерної відстані дії лазерного променя до 5 *nm* формування самоорганізованих вакансійних структур є можливим тільки при низькій температурі підкладки $T_{min} < 220 \text{ K}$ (рис. 1.5, b). При зменшенні характерної відстані дії лазерного променя до 3 *nm* формування самоорганізованих вакансійних структур є можливим при будь-якій температурі підкладки T_{min} (рис. 1.5, c).

1.3. Деформаційно-дифузійний розподіл точкових дефектів в об'ємних напівпровідниках і гетеросистемах

У цьому параграфі аналізується стан досліджень самоузгодженого деформаційно-дифузійного просторового перерозподілу точкових дефектів, параметра деформації кристалічної ґратки та ефектів самоорганізації дефектно-деформаційних структур у напівпровідникових монокристалах і гетероструктурах.

Процес вирощування плівки на монокристалічній підкладці часто супроводжується виникненням пружних деформацій і напружень в обох контактуючих середовищах. В роботах [45, 46] методом анізотропної теорії пружності розраховано розподіл компонентів тензора пружних напружень, які виникають в процесі епітаксійного росту. Тут було враховано також появу дислокацій на межі поділу підкладка – плівка.

Однак, напруження в напівпровідникових матеріалах можуть виникати як за рахунок наявності власних точкових дефектів, так і домішок [3, 47-51]. Такі напруження суттєво впливають на процес дифузії домішок [48-52] і власних дефектів [52], що відображається на їх стаціонарному розподілі. Так, в роботі [51] проведено в лінійному наближенні теоретичне дослідження іонної імплантації з врахуванням

ненульового об'єму імпантованих іонів на основі стаціонарного рівняння дифузії. Запропоновано модель “деформаційного втягування”, в основу якої покладено потік домішок, модифікований деформаційними ефектами. У цій же роботі показано, що деформаційний потік протидіє дифузійному і, за певних умов, може його перевищувати.

У роботах [48-50] розглядається генерація механічних напруг в твердому тілі при імплантаційному легуванні та інших суттєво нерівноважних способах введення домішкових атомів. Встановлено, що для ефективної роботи механізму деформаційного втягування необхідне одночасне виконання трьох умов: 1) достатньої кількості домішок на заданій глибині; 2) максимального градієнта механічних напружень в цій же області; 3) температури, достатньої для того, щоб легуючі атоми стали рухливими. Сумісне виконання цих умов можливе не завжди [48]. По перше, область максимального градієнта напружень (якщо ці напруження створюються тільки імпантованими іонами) розташовується глибше, ніж середній пробіг іона, тобто деформаційне втягування діє перш за все на ті атоми домішок, глибина залягання яких вже “більша середньої”. По друге, для великої рухливості домішкових атомів необхідні високі температури і може виявитися, що ще до досягнення цих температур більша частина дефектів (і механічних напруг) буде відпалена. Досягнення останнього фактору можливе лише при радіаційно-стимульованій міграції атомів, що не потребує сильного нагрівання.

Сам по собі механічний стиск чи розтяг кристалу не спричиняє напрямленого потоку легуючої домішки (така деформація є причиною зміни тільки коефіцієнта дифузії). Однак, при певних умовах, виникають великі градієнти механічних напружень [53, 54]. Це означає, що окрім дифузійного руху (який характеризується однаковою ймовірністю перескоку атома вперед і назад), з'являється напрямлений потік атомів. Його величина і напрямок залежать від кристалічної структури та кристалографічної орієнтації зразка.

У роботі [48] встановлено, що деформаційний потік переважатиме дифузійний при умові, коли відносна концентрація домішок C

$$C > \frac{k_B T}{W} \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \frac{\rho}{r_1},$$

де W – величина дифузійного бар'єра; k_B – стала Больцмана; T – температура; ν – коефіцієнт Пуассона; r_1 – характерний радіус дифузійного каналу; ρ – константа, яка входить у вираз для

модельного потенціалу відштовхування між атомами: $U(r) \sim e^{-\frac{r}{\rho}}$.

Таким чином, чим менша температура, тим менше граничне значення концентрації, при перевищенні якого механізм “деформаційного втягування” домішок переважає над дифузією. Враховуючи, що W/kT для напівпровідників становить $\sim 50-60$ і відношення $\frac{\rho}{r_1} = 0.2 - 0.3$, отримаємо, що гранична концентрація C змінюється в межах $0.1-0.3\%$.

Ефект деформаційного втягування помітно підсилюється [48], якщо одночасно з імплантацією домішкових іонів виконувати одну з наступних операцій: а) опромінення імплантованого шару іонами з метою створення додаткових механічних напружень в потрібній області; б) термоциклювання зразка під час імплантації (з перериванням імплантації на час нагрівання або без переривання); в) додаткове знакозмінне деформування зразка (або згином, або об'ємною ультразвуковою хвилею, або поверхневою акустичною хвилею).

Однак, у вище згаданих роботах [48-51] розрахунки концентрації домішок та параметра всебічної деформації проводились в лінійному наближенні без врахування ангармонічних доданків, які можуть бути значними при великій концентрації дефектів, та без врахування самоузгодженого зв'язку електронної системи із ансамблем дефектів.

У роботі [3] експериментально досліджено залежності невідповідності параметра ґратки та концентрації точкових дефектів у епітаксійному шарі GaAs від співвідношення потоків миш'яку та галію

$\frac{J_{As}}{J_{Ga}}$. Показано, що такі залежності носять немонотонний характер, а саме в інтервалі $1 < \frac{J_{As}}{J_{Ga}} < 5$ параметр ґратки та концентрація дефектів різко зростає, а за межею цього інтервалу ($\frac{J_{As}}{J_{Ga}} > 5$) плавно зменшуються. Такі ефекти пояснюються утворенням кластерів миш'яку [7, 47, 55], які утворюються після відпалу напівпровідникового матеріалу GaAs. Утворення кластерів миш'яку супроводжується зменшенням деформації ґратки GaAs і зменшенням її параметра до величини характерної для стехіометричного арсеніду галію [3].

В роботі [56] побудована модель утворення надґратки антиструктурних дефектів під дією ядерного опромінення. В результаті відмінності розмірів атомів різного сорту навколо антиструктурного дефекту створюється пружне поле, яке призводить до взаємодії між дефектами. При великій концентрації антиструктурних дефектів кристал стає нестійким відносно просторово-однорідного розподілу. Така нестійкість призводить до періодичної модуляції густини антиструктурних дефектів.

При взаємодії потужних лазерних імпульсів з поверхнею твердих тіл (металів, напівпровідників і полімерів) спостерігається утворення періодичних структур рельєфу поверхні, які зберігаються після закінчення дії імпульсу [57-64]. Такі структури були ідентифіковані в [59, 60] як новий клас індукованих дефектно-деформаційних (ДД) структур, а нестійкості, в результаті яких вони утворюються, були названі в огляді [61] генераційно-дифузійно-деформаційними нестійкостями (ГДДН) (в роботі [59] також використовувався термін концентраційно-деформаційно-теплові нестійкості).

Фізичний механізм виникнення ГДДН полягає в наступному [59]. Потік зовнішніх частинок генерує в опроміненому матеріалі значні концентрації точкових дефектів N_d (електронно-діркових пар, вакансій, міжвузлових атомів, домішок і ін.). Флуктуаційна гармоніка поля

пружної деформації $U(r,t) = \text{div} \xi(r,t)$ ($\xi(r,t)$ – вектор зміщення середовища) призводить до появи деформаційно-індукованих потоків дефектів і (або) до модуляції швидкості їх утворення за рахунок перенормування енергії утворення дефектів. Це є наслідком ДД взаємодії, густина енергії якої задається формулою [65]

$$H_d = -\theta_d N_d U, \quad (1.10)$$

де $\theta_d = K \Delta \Omega$ – деформаційний потенціал; K – модуль всестороннього стиску; $\Delta \Omega$ – зміна об'єму кристалу при створенні одного дефекту.

В результаті виникає просторово-неоднорідне поле концентрації дефектів $N_d(r,t)$ (дифузійна змінна) і з'являються сили, які пропорційні градієнтам концентрації дифузійної змінної, що деформують середовище. При перевищенні критичної концентрації дефектів або критичної швидкості їх генерації ці сили є причиною наростання вихідної флуктуації деформації, що призводить до розвитку ГДДН з утворенням впорядкованих ДД-структур – кластерів дефектів, автолокалізованих у створених ними ж деформаційних ямах.

Таким чином, система дефектів з дефектно-деформаційною взаємодією (1.10) є внутрішньо нестійкою відносно переходу в просторово-неоднорідний стан. Вперше це явище було описане в роботі [66] при аналізі на стійкість системи з двох зв'язаних рівнянь дифузії і деформації в об'ємному матеріалі.

У роботі [59] була розроблена загальна концепція поверхневих ГДДН, сформульовані і розвинуті базові математичні моделі ГДДН на поверхні напівбезмежного середовища і в плівках. Були запропоновані наступні моделі ДД нестійкостей з утворенням періодичних ДД структур на поверхні твердого тіла і в плівці: електронно-теплова і вакансійна [59] – на поверхні напівбезмежного твердого тіла; вакансійна [43] та вакансійно-пориста [59, 67, 68] – в плівках з деформацією згину. В межах даних моделей ГДДН на поверхні і в плівці було передбачено, що період ДД структур визначається товщиною дефектно-збагаченого приповерхневого шару (або товщиною плівки).

Теорія ГДДН використовувалась не тільки для опису крупномасштабних періодичних структур дефектів, але і лазерно-індукованого порогового утворення локалізованих дефектів – пор і дислокацій [69, 70]. Авторами [71] побудована дефектно-деформаційна модель утворення нерегулярних шершавостей на поверхні напівпровідників під дією лазерного опромінення. Нелінійні моделі ГДДН розвивались і використовувались також для опису утворення періодичних субграниць при лазерній перекристалізації тонких плівок [72].

В основі математичної моделі розвитку деформаційно-дифузійних нестійкостей лежить фізична модель пружно анізотропної плівки на субстраті [59]. У даній моделі дефектно-збагачений шар товщиною h розглядається як “плівка” з густиною ρ і модулем Юнга E , жорстко з’єднана з субстратом, під яким розуміють решту частини кристала з параметрами пружності ρ_s і E_s . Площина з’єднання плівки із субстратом $z=0$ паралельна поверхні (100), при цьому вісь z напрямлена в глибину кристалу (рис.1.1), а осі x та y – вздовж двох ортогональних кристалографічних напрямків типу [100]. Рис.1.6а відповідає стану, коли дефекти рівномірно розподілені вздовж поверхні плівки. На рис.1.6б показана плівка при ДД нестійкості (плівка періодично вигнута, дефекти виду центру розтягу зібрані в областях максимальної деформації розтягу, а дефекти виду центру стиску – в областях максимальної деформації стиску).

Вважаючи, що дефекти ефективно перерозподіляються тільки вздовж плівки, можна записати

$$N_d(x, y, z, t) = N_d(x, y, t) \exp(-\gamma(z - h)). \quad (1.11)$$

Тут $N_d(x, y, t)$ – концентрація дефектів на поверхні; γ – константа, що визначає товщину дефектно-збагаченого шару ($\gamma^{-1} = h$).

Потік дефектів вздовж поверхні складається з дифузійної і деформаційно-індукованої частин. У випадку ізотропної дифузії [59]

$$J_d = -D_d \text{grad}_{||}(N_d) + N_d D_d \frac{\theta_d}{k_B T} \text{grad}_{||}(\text{div} \xi_f) \quad (1.12)$$

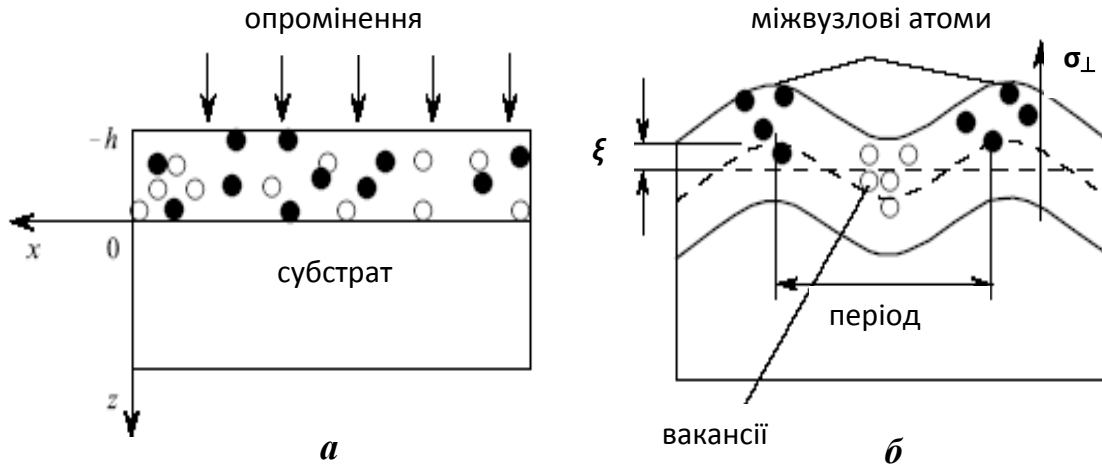


Рис.1.6. Модель плівки на підкладці:

a – вихідний стан: „плівка” недеформована;

б – деформована плівка при деформаційно-дифузійній нестійкості [43]

Знак $\|$ вказує на відповідне диференціювання по x і y ; D_d – коефіцієнт дифузії дефектів; ξ_f – вектор зміщення середовища в плівці.

З використанням (1.12), з рівняння неперервності отримуємо для N_d рівняння дифузії з врахуванням просторово неоднорідних вздовж поверхні дрейфу і генерації дефектів:

$$\frac{\partial N_d}{\partial t} = D_d \Delta_{\parallel} N_d - \frac{N_d}{\tau_d} - D_d \frac{\theta_d}{k_B T} \text{div}_{\parallel} (N_d \text{grad}_{\parallel} \text{div}_{\parallel} \xi_f) + G_d, \quad (1.13)$$

де τ_d – час життя дефекту, а швидкість генерації дефектів G_d лазерним випромінюванням промодульована деформацією плівки $\text{div}_{\parallel} \xi_f = U_f$:

$$G_d = G_{d0} + \frac{\partial G_d}{\partial U_f} U_f$$

(G_{d0} – просторово-однорідна швидкість генерації дефектів).

Деформація плівки ξ_f виражається через координату згину плівки ξ – зміщення точок середньої площини плівки по осі z відносно положення рівноваги (рис. 1.6):

$$\xi_f = -\sigma(z + \frac{h}{2})\Delta_{\parallel}\xi + \frac{1}{2}(\text{grad}_{\parallel}\xi)^2, \quad (1.14)$$

де $\sigma = \frac{1-2\nu}{1-\nu}$.

Для плівки з орієнтацією (100) координата ξ задовольняє рівнянню

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} + l_0^2 c^2 \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2A \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} \right) \xi + f_{nl} + \sum_d \frac{\nu \theta_d}{\rho h} \int_{-h}^0 (z + \frac{h}{2}) \Delta_{\parallel} N_d dx = \frac{\sigma_{\perp}}{\rho h}, \quad (1.15)$$

де коефіцієнт жорсткості плівки c^2 виражається через пружні сталі C_{11} , C_{12} , C_{44} кубічного кристалу [73]; A – коефіцієнт пружної анізотропії; $l_0^2 = \frac{h^2}{12}$; σ_{\perp} – нормальна складова механічної напруги до поверхні плівки (реакція субстрата). Функція f_{nl} враховує нелінійність згину в ізотропній плівці [74]:

$$f_{nl} = \frac{1}{\rho} \left(\sigma_{xx} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \sigma_{yy} \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + 2\sigma_{xy} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x \partial y} \right) \Big|_{z=-h/2},$$

де компоненти тензора механічної напруги

$$\sigma_{xx} = -\frac{\rho c_l^2}{2} \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \nu \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 \right];$$

$$\sigma_{yy} = -\frac{\rho c_l^2}{2} \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \nu \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 \right];$$

$$\sigma_{xy} = A \rho c_l^2 (1 - \nu) \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial y},$$

де c_l – поздовжня швидкість звуку.

Система деформаційно-дифузійних рівнянь (1.13-1.15) є замкнутою і описує генераційно-дифузійно-деформаційні нестійкості в моделі пружно анізотропної плівки на субстраті.

У роботі [75] показано, що в ізотропному безмежному твердому тілі з високою концентрацією точкових дефектів N_{d0} деформація, яка створюється пробним дефектом, спадає з відстанню від нього за

законом, аналогічним закону спадання потенціалу точкового заряду з дебаєвським екрануванням

$$U(r) = \frac{\theta_d}{\rho c_l^2 4\pi d_d^2 \left(\frac{N_{d0}}{N_{dc}}\right)} \frac{\exp(-r/r_s)}{r},$$

де N_{dc} – деяка критична концентрація дефектів.

При цьому аналогом радіуса Дебая є радіус екранування пружної взаємодії r_s , який залежить від концентрації дефектів N_{d0} та довжини взаємодії дефект-атом l_d . У граничному випадку ($N_{d0} \rightarrow 0$) вираз для деформації співпадає із звичайним виразом для поля деформації точкового заряду в безмежному бездефектному ізотропному середовищі.

В роботах [9, 76] записано вираз для густини вільної енергії одновимірного деформованого ангармонічного кристалу з дефектами з врахуванням нелокальності взаємодії атомів ґратки між собою та з дефектами

$$f = \frac{1}{2} \rho c_l^2 U^2 + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} U + \frac{1}{3} \alpha \rho c_l^2 U^3 + \frac{1}{4} \beta \rho c_l^2 U^4 - \\ - \theta_d N_d U - \theta_d N_d l_d^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - TS, \quad (1.16)$$

де S – ентропія системи, α, β – константи пружного ангармонізму.

З (1.16) було отримано вираз для напруження в ангармонічному

кристалі з дефектами $\sigma = \frac{\partial f}{\partial U}$

$$\sigma = \rho c_l^2 U + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + \alpha \rho c_l^2 U^2 + \beta \rho c_l^2 U^3 - \theta_d N_d$$

та нелінійне рівняння для самоузгодженої деформації твердого тіла, яка створюється стаціонарним розподілом лазерно-індукованих точкових дефектів

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = c_l^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^4 U(x)}{\partial x^4} + \alpha c_l^2 \frac{\partial^2 (U^2)}{\partial x^2} + \beta c_l^2 \frac{\partial^2 (U^3)}{\partial x^2} - \frac{\theta_d}{\rho} \frac{\partial^2 N_d(x)}{\partial x^2}. \quad (1.17)$$

В цьому рівнянні враховані ангармонізми пружного континууму третього та четвертого порядку. В роботах [9, 76] знайдено точний розв'язок нелінійного дефектно-деформаційного рівняння (1.17) з врахуванням розв'язку (1.13) в лінійному наближенні і показано, що залежно від величини перевищення зовнішнього контрольованого параметру (концентрації лазерно-індукованих дефектів N_{d0}) порогового значення утворюються або локалізовані дефектно-деформаційні структури (симетричні і антисиметричні кластери), або періодичні дефектно-деформаційні структури.

В роботі [76] знайдені умови утворення цих двох типів дефектно-деформаційних структур і визначені їх характеристики: розміри і форми кластерів, період періодичної структури, просторовий розподіл деформації і концентрації дефектів в об'ємному матеріалі з дефектно-деформаційними структурами без врахування електрон-деформаційної взаємодії. Знаючи і регулюючи параметри, які визначають умови їх формування, можна керувати утворенням тих чи інших структур [77].

Утворення періодичної ґратки пор спостерігалось в металах [78] і оптичних діелектричних матеріалах [79] при опроміненні їх пучками частинок. Експериментальні результати роботи [62] були використані в [76] для апробації даної теорії нанометрової дефектно-деформаційної самоорганізації. Було отримано добре узгодження експериментальних даних та теоретичних розрахунків залежності періоду нанометрової ґратки від температури. Узгодження дефектно-деформаційної теорії і експерименту досягається при параметрі $l_d/l_0 = 6$, тобто довжина взаємодії дефектів з атомами структури є набагато більшою від довжини взаємодії атомів між собою.

В роботі [58] зазначено, що поблизу границь виникнення дефектно-деформаційних структур, останні формуються не по всій поверхні, а лише всередині окремих “плям”, які інтерпретуються як місця підвищеної концентрації біографічних дефектів. Цей ефект може бути корисним для виявлення і декорування дефектних областей.

Граничне утворення як мікронних, так і нанометрових дефектно-деформаційних структур повинно супроводжуватися граничною зміною механічних, оптичних і електронних властивостей напівпровідників [59]. Цей практично важливий аспект даної проблеми вивчений на сьогоднішній день недостатньо.

У роботах [71, 80-82] зазначається, що фазовий дефектно-деформаційний перехід на поверхні може слугувати механізмом порогового утворення нанометрової шершавості під дією зовнішніх чинників, які призводять до ефективної генерації точкових дефектів. Розглянуто дефектно-деформаційний механізм плавлення твердих тіл і показано, що при певній температурі, близькій до температури плавлення, концентрація дефектів досягає критичного значення, при якому спонтанно з'являється нанометровий рельєф (шершавість) поверхні. При цьому має місце значне підсилення лінійних і нелінійно-оптичних ефектів. Одним з можливих оптичних проявів дефектно-деформаційної самоорганізації в прозорих діелектриках є поява сильного оптичного поглинання, що призводить до оптичного пошкодження [59, 83]. При цьому процеси кластероутворення можуть набувати хвильового характеру: в лазерно-індукованих середовищах можуть поширюватися хвилі утворення точкових дефектів і кластероутворення із швидкістю близькою до швидкості звуку [84, 85].

Звичайно фазові переходи спостерігались і досліджувались в системах дефектів з безмежним часом життя. Однак в багатьох системах (наприклад, система вакансій та міжвузлових атомів, яка створена потоком високоенергетичних частинок) створюються дефекти із скінченим часом життя. В роботі [86] вивчено процеси розшарування на фази системи частинок, які генеруються зі сталою швидкістю і мають скінчений час життя. Показано, що розшарування на фази (кластеризація) можливе, якщо час життя частинок є більшим від деякого критичного значення.

В результаті кластеризації в області низьких температур має місце розшарування на фази з великою та малою концентрацією дефектів [87].

Кластеризація домішок впровадження призводить до значного зменшення їх коефіцієнта дифузії. В цьому випадку реалізується переважно два механізми дифузії [87]: 1) за рахунок окремих домішок, які відриваються від кластерів, а потім знову захоплюються ними; 2) за рахунок рухливості самих кластерів. В роботі [87] досліджено вплив рухливості кластерів на коефіцієнт дифузії домішок впровадження і показано, що величина цього впливу залежить від параметрів потенціалу взаємодії домішок.

Автори роботи [88] розглянули кінетику зміни розподілу кисню у кремнії та утворення кисневих комплексів, які описуються системою відповідних нелінійних рівнянь. Отримано аналітичний розв'язок для однорідного нестационарного розподілу кисню та його комплексів. Показано, що завдяки взаємодії між атомами кисню їх однорідний розподіл при певних параметрах стає нестійким і формується просторово-періодична структура густини атомів кисню.

З приведенного огляду літератури з даної проблеми видно, що на сьогоднішній день недостатньо вивчені механізми самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу точкових дефектів у напружених епітаксійних шарах та гетеросистемах, де деформація виникає не тільки за рахунок наявності дефектів, але і невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів.

Зокрема, явище пасивації електрично і фотоактивних дефектів і домішок атомарним воднем добре вивчене в однорідних напівпровідниках (Si, GaAs, InP) [89, 90] і гетероструктурах зі слабо напруженими квантовими ямами [91, 92]. Однак в гетероструктурах GaAs/InGaAs з напруженими квантовими ямами ефект пасивації виражений значно слабше [91, 93]. Однією з причин може бути здатність напружених гетерошарів затримувати дифузію дефектів і домішок [94]. Причому, залежно від знаку напружень, які створюються дефектами і домішками, вони повинні накопичуватися в матеріалі бар'єру або квантової ями. В експериментальній роботі [95] показано, що напружені квантово-розмірні гетерошари затримують дифузію

водню і дефектів в об'єм, що призводить до істотної відмінності просторового розподілу і процесів утворення рекомбінаційно активних і пасивованих комплексів в гетероструктурі та однорідних шарах.

1.4. Взаємодія електронної підсистеми з точковими дефектами в об'ємних напівпровідниках та гетеросистемах

У просторовому перерозподілі точкових дефектів та домішок у напівпровідниковому матеріалі значну роль відіграє їх взаємодія з електронною підсистемою [96-98]. Ця взаємодія проявляється в перерозподілі домішок по зарядовим станам, у зміні концентрації дефектів та в існуванні внутрішнього електричного поля, яке створюється нерівномірно розподіленими домішковими іонами і носіями – електронами і дірками [97-99]. Ці ефекти особливо проявляються, коли концентрація домішок значно перевищує концентрацію власних носіїв струму [100]. У випадку однієї домішки, яка дифундує у власний напівпровідник, таке поле прискорює міграцію. При цьому має місце збільшення коефіцієнта дифузії при збільшенні концентрації домішок.

У роботах [101-104] представлені результати дослідження просторового розподілу радіаційних дефектів у лужно-галоїдних кристалах фториду літію, хлоридів натрію і калію.

При дослідженні картин електронно-мікроскопічного декорування лужно-галоїдних кристалів, опромінених іонізуючим випромінюванням, отриманих авторами [105-107], було виявлено, що в цих матеріалах утворюються області накопичення радіаційних дефектів з протилежним електричним зарядом.

На основі моделі розвитку концентраційно-деформаційно-теплових нестійкостей для випадку ізотропного твердого тіла було розглянуто утворення заряджених областей радіаційних дефектів у кристалах, які утворюються під дією електронного опромінення, і розраховані відстані між однаково зарядженими областями.

Утворення протилежно заряджених областей радіаційних дефектів пояснюється тим, що катіонні і аніонні точкові дефекти, які створені зовнішнім опроміненням призводять до виникнення пружних деформацій кристалічної ґратки. Взаємодія заряджених дефектів через поле деформації є причиною їх просторового перерозподілу, в результаті чого спостерігається чергування позитивно і негативно заряджених областей накопичення дефектів. При цьому дефекти виду центру стиску будуть розподілятися в областях стиску, а дефекти виду центру розтягу – в областях розтягу. Тобто в лужно-галоїдному кристалі будуть поширюватись пружні хвилі, пов'язані з катіонними і аніонними радіаційними дефектами, що призводять до їх перерозподілу по протилежно зарядженим ділянкам [101, 102].

При аналізі картин декорування опромінених і неопромінених кристалів хлориду натрію було виявлено, що періоди одиночних одновимірних впорядкованих структур, які складаються з дефектів росту і радіаційних дефектів, дещо відрізняються, але порядок їх величини залишається незмінним. Таку відмінність можна пояснити, якщо припустити, що структури були створені різними типами дефектів. Оскільки період впорядкованої структури залежить від довжини взаємодії радіаційних дефектів з іонами кристалу і для різнотипних дефектів вона різна, то, відповідно, і періоди структур, які утворюються, будуть різними.

Наявність заряджених областей накопичення дефектів і впорядкованих структур точкових дефектів у лужно-галоїдних кристалах після їх взаємодії з іонізуючим випромінюванням є свідченням того, що в даних матеріалах відбуваються процеси самоорганізації.

Прогрес розвитку сонячної енергетики пов'язаний із створенням багатоперехідних (каскадних) сонячних елементів на основі напівпровідникових сполук [108]. Збільшення кількості *p-n* переходів у каскадних сонячних елементах дозволяє значно розширити спектральну область фотоактивного поглинання сонячного випромінювання і

зменшення втрат енергії, які притаманні для одноперехідних сонячних елементів.

Останнім часом зріс великий інтерес до досліджень фізичних властивостей різних контактів, які виникають поблизу межі поділу двох електронних систем. На відміну від звичайних p - n переходів, $2D$ p - n переходи мають ряд специфічних особливостей. Зокрема, вільні носії заряду знаходяться в площині двовимірного газу, контактне електричне поле зосереджене в оточуючому просторі і екранується слабо, а утворені збіднені області об'ємного заряду мають відносно велику протяжність. Відповідно, $2D$ p - n переходи повинні характеризуватися більшою напругою пробою, ніж звичайні p - n переходи. Крім цього, якщо врахувати, що двовимірний електронний газ характеризується високою рухливістю, то дослідження $2D$ p - n переходів відкривають широкі перспективи у фізиці двовимірних систем, зокрема, в плані створення нового сімейства височастотних діодів, варикапів [109].

Однак, не вивченим залишається питання можливості створення p - n переходів у напружених напівпровідникових кристалічних системах із самоорганізованими точковими дефектами.

У роботах [1, 110, 111] як експериментально, так і теоретично досліджено вплив потоків іонізуючого випромінювання на електрофізичні параметри епітаксійних плівок $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, вирощених методом молекулярно-пучкової епітаксії.

Для знаходження розподілу об'ємної концентрації електронів $n(x)$ за глибиною x опроміненої епітаксійної плівки розв'язувалась система рівнянь для дифузії радіаційних дефектів та рівняння електронейтральності. Розрахунок проводився в двозонному наближенні з врахуванням дефектної структури матеріалу і враховувались не тільки енергетичні рівні радіаційних дефектів, але і рівні дефектів вихідного матеріалу.

Експериментальні дослідження [110] координатної залежності концентрації електронів показали, що така залежність носить

немонотонний характер з максимумом при $x = 400 \text{ \AA}$. Крім цього, спостерігається значний спад концентрації електронів поблизу поверхні. Можна припустити, що такий характер концентраційного профілю електронів у напівпровідниковому матеріалі із точковими дефектами можна пояснити самоузгодженими електрон-деформаційно-дифузійними ефектами, які не враховувались в роботах [1, 110, 111].

Невпинний технологічний прогрес розробки і створення квантово-розмірних гетероструктур і приладів на їх основі вимагає розробки адекватних сучасних та вдосконалення існуючих методів аналізу і контролю нанорозмірних структур. Окрім контролю морфологічної структури наносистем, для створення напівпровідникових приладів велике значення має діагностика їх електронної системи.

У роботах [112, 113] розвинуто метод вольт-фарадних характеристик діагностики квантово-розмірних гетероструктур, що дозволяє визначати основні електронні властивості: розрив зон, концентрацію носіїв струму, рівні квантування.

Традиційний підхід до розрахунку вольт-фарадних характеристик гетероструктур бере початок від роботи [114], в якій моделюється різкий ізотипний $n-n^+$ перехід. Величина розриву зони провідності ΔE_c на гетеромежі знаходилась з електростатичного дипольного моменту, пов'язаного з небалансом заряду, який визначався розбіжністю між припустимо відомим розподілом концентрації легуючих домішок $N(x)$ і знайденого з експериментальної вольт-фарадної залежності профілю розподілу основних носіїв заряду $n(x)$, з використанням співвідношення

$$\Delta E_c = \left(\frac{e^2}{\varepsilon} \right) \int_0^\infty [N(x) - n(x)](x - x_j) dx - k_B T \ln \left(\frac{n_2 N_{c1}}{n_1 N_{c2}} \right),$$

де ε – діелектрична проникність; $n_{1,2}$ – асимптотичні величини легування зліва і справа від гетеропереходу; N_{c1} , N_{c2} – ефективна густина станів у відповідній зоні провідності; x_j – положення гетеропереходу.

Розрахунок вольт-фарадних характеристик гетероструктур з квантовою ямою в роботах [112, 113] базується на числовому самоузгодженому розв'язку одномірного рівняння Пуассона

$$\varepsilon_0 \frac{d}{dx} \left[\varepsilon(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} \right] = e [N_D^+(x) - n(x)] \quad (1.18)$$

і одномірного рівняння Шредінгера в наближенні ефективної маси в формі БенДанієла Дюка [115]

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \psi_i(x) \right] + V(x) \psi_i(x) = E_i \psi_i(x). \quad (1.19)$$

У рівняннях (1.18), (1.19) N_D^+ – концентрація іонізованих донорів, $\varphi(x)$ – електростатичний потенціал; $m^*(x)$ – ефективна маса електрона; E_i – енергія i -го рівня квантування; $\psi_i(x)$ – хвильова функція електрона на відповідному рівні; $V(x)$ – профіль потенціальної енергії, що враховує величину розриву зон провідності на гетеропереході.

Для розрахунку розподілу зв'язаних і вільних носіїв заряду легованої напівпровідникової структури з квантовою ямою авторами [112, 113] була запропонована модель “квантового ящика” з ідеально твердими стінками. В межах даної моделі концентрація носіїв заряду розраховувалась наступним чином: у центральній частині ящика, який містить квантову яму, розв'язувалось рівняння Шредінгера (1.19), а за межами ящика використовувався квазікласичний підхід до розрахунку концентрації вільних носіїв заряду з інтегралу Фермі з врахуванням вигину зон

$$n(x) = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(-\frac{E_c - E_F - e\varphi(x)}{k_B T} \right), \quad (1.20)$$

де E_F – енергія рівня Фермі.

Для розрахунку концентрації носіїв струму в області ями приймалось до уваги, що в двох напрямках в площині ями електрони рухаються як вільні, утворюючи підзони розмірного квантування [116, 117].

Оскільки в рівнянні Пуассона (1.18) концентрація вільних носіїв заряду $n(x)$ є функцією від $\varphi(x)$, його попередньо лінеаризували, тобто

представили у вигляді початкового наближення і поправки: $\varphi(x) = \varphi_0(x) + \Delta\varphi(x)$. Перше наближення бралось у вигляді потенціалу збідненого шару Шотткі (з прикладеним зворотнім зміщенням U)

$$\varphi_0(x) = U \left(1 - \frac{x}{w}\right)^2 \quad (1.21)$$

Тут $w = \sqrt{2\varepsilon\varepsilon_0(U - U_{bi})/qN_D^+}$ – ширина області об’ємного заряду в наближенні різкої границі [118]; U_{bi} – потенціал на бар’єрі Шотткі (~ 0.7 В для GaAs).

Рівняння Пуассона розв’язувалось числовим методом Ньютона відносно поправки $\Delta\varphi(x)$. На гетеропереходах виконувалась умова зшивання електростатичного потенціалу

$$\varepsilon_b \frac{d\varphi_b}{dx} = \varepsilon_w \frac{d\varphi_w}{dx}, \quad (1.22)$$

де індекси b і w відносяться до бар’єру і ями, відповідно.

В результаті самоузгодженого розв’язку був отриманий одночастинковий потенціал з врахуванням кулонівського потенціалу електронів у ямі і профіль концентрації електронів у гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs.

У цій же роботі було експериментально отримано концентраційний профіль електронів у гетероструктурі. Розрив зон провідності матеріалів гетеросистеми ΔE_c вибирався таким чином, щоб узгодити теоретичні розрахунки із експериментальними даними.

Однак у таких легованих гетероструктурах з напруженими квантовими ямами значний вплив на електронні властивості мають деформаційні ефекти, що виникають як за рахунок невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетероструктури, так і наявності точкових дефектів, які при певних умовах самоорганізуються і утворюються нанокластери [9, 119]. Тому виникає необхідність самоузгодженого розв’язку систем рівнянь

Пуассона (1.18) та Шредінгера (1.19), доповнених рівняннями для деформації та концентрації точкових дефектів.

Частково цю проблему було розв'язано в роботах [120-124], де запропоновано та розвинуто метод розрахунку електрон-деформаційного потенціалу ізовалентної, неізовалентної домішок та плоского дефекту в залежності від ефективного радіусу домішок, ширини перехідної області плоского дефекту та ступеня заповнення зони провідності ($0 \leq \bar{n} \leq 2$), який залежить від складу компонент твердих розчинів [125-127].

Зокрема, в роботах [120, 122-124] запропоновано методику розрахунку електронного спектру у кристалічних системах з неузгодженими ґратками та досліджено залежність зміни параметра ґратки кристалу з точковими дефектами від ступеня заповнення електронами зони провідності, вклад електронної складової деформації в роботу виходу електронів з неоднорідно деформованого кристалу, магнето-деформаційні ефекти у дефектній кристалічній ґратці.

У роботах [121, 128, 129] було показано, що в результаті самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку механічні спотворення кристалічної матриці, спричинені дефектами, дислокаціями чи контактуючими областями гетероструктур, можуть істотно змінюватися.

У роботах [131, 132] побудована мікроскопічна електрон-деформаційна модель напружених гетеросистем. В межах цієї моделі розглянуто механізм виникнення у напруженій надґратці локальних електрон-деформаційних ям, електрон-деформаційного диполя, розраховано спектр електрона та інтенсивність розсіяння Х-променів у напруженій надґратці з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії в залежності від концентрації носіїв та товщини нарощуваного шару (ширини квантової ями). Досліджено вплив перехідної області механічно-напруженої гетероструктури на електронний спектр і хвильові функції та електричного поля на напружений стан гетероструктури.

Усі ці задачі були розв'язані в лінійному наближенні та без врахування самоузгодженого просторового перерозподілу точкових дефектів в деформаційному полі, яке виникає за рахунок наявності точкових дефектів, перерозподілу електронної густини та невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів кристалічної системи.

Одним з факторів, що характеризує взаємодію домішок з електронною підсистемою, є зміна концентрації дефектів (вакансій і міжвузлових атомів), під дією яких здійснюється дифузія домішок [97-99, 130]. При значному ступені легування, наприклад, донорною домішкою, концентрація вакансій різко (на 1 – 2 порядки) зростає [130], що призводить до прискорення дифузії домішок, які переміщуються по вакансіям.

В експериментальних роботах [3, 47] проведені дослідження шарів InGaAs, вирощених методом молекулярно-променевої епітаксії на підкладці InP (100) та шарів GaAs на підкладці GaAs при температурах 150-480°C і різних потоках миш'яку. Показано, що в таких матеріалах надлишковий миш'як захоплюється у вигляді антиструктурних дефектів, що призводить до формування кластерів миш'яку. Концентрація кластерів становить $\sim 8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а їх середній розмір $\sim 5 \text{ нм}$.

В роботі [3] досліджувалась залежність відносної зміни параметра ґратки (рис.1.7а) та концентрації точкових дефектів (рис.1.7б) напівпровідникового матеріалу GaAs легованого та нелегованого домішками кремнію від відношення потоків миш'яку та галію $\frac{J_{As}}{J_{Ga}}$.

Показано, що легування кремнію призводить до зменшення параметра ґратки та концентрації дефектів. Причому спроба пояснити це явище механіко-деформаційними ефектами, а саме, різницею іонних радіусів кремнію та галію, дає занижений результат порівняно із результатами експериментальних досліджень.

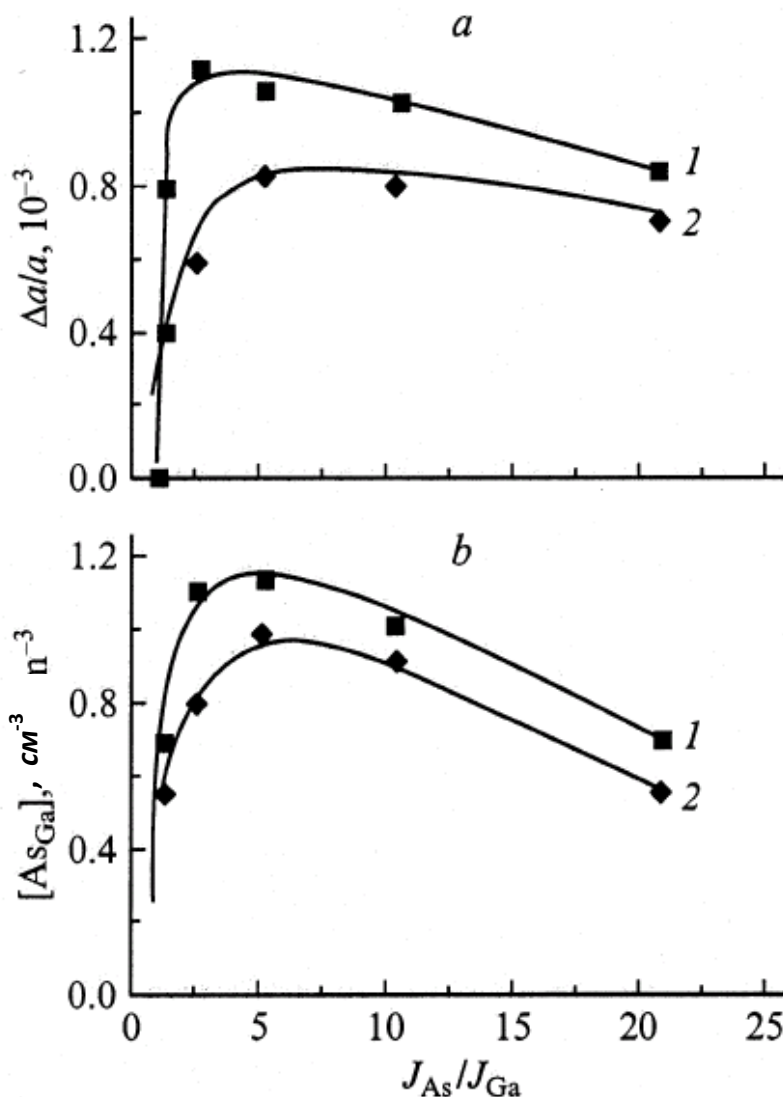


Рис. 1.7. Вплив відношення потоків $\frac{J_{As}}{J_{Ga}}$ на зміну параметра ґратки (a) і

концентрацію дефектів As_{Ga} (b) для шарів GaAs:

1 – нелегованих, 2 – легованих кремнієм

В цій же роботі досліджувалась кореляційна залежність концентрації електронів легованого кремнієм напівпровідникового GaAs від середньої концентрації точкових дефектів (надлишкового миш'яку). Було встановлено, що при збільшенні концентрації дефектів на порядок, концентрація електронів зменшується на чотири порядки.

Це дає змогу зробити висновок, що існує зв'язок між деформаційно-дефектною та електронною системами, що призводить до зміни електрофізичних параметрів напівпровідникового матеріалу. Припускалось, що такий ефект в GaAs може бути пов'язаний з утворенням кластерів миш'яку.

В експериментальних роботах [131, 132] досліджено можливість зменшення ефективного часу життя нерівноважних носіїв заряду шляхом контрольованого створення власних дефектів в базових шарах напівпровідникових приладів, які виникають через неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетероструктури та при опроміненні γ -квантами, при збереженні значень блокуючих напруг.

Гетероструктури на основі напівпровідників $A^{III}B^V$ використовуються для виготовлення приладів мікро- та оптоелектроніки, які в багатьох випадках експлуатуються в умовах дії різних радіаційних факторів. Тому при конструюванні подібних приладів та прогнозуванні їх радіаційної стійкості важливою задачею є вивчення причин зміни їх властивостей під впливом опромінення [133-135]. Цими причинами, крім виникнення дефектів, можуть бути зміни складу і товщини шарів і модифікація гетеромеж між ними [136]. Вказані структурні зміни, які призводять до зміни електричних характеристик приладу за рахунок формування $n-n^+$ переходів у напівпровідниковому матеріалі із самоорганізованими точковими дефектами, на сьогоднішній день залишаються невивченими.

Напруження, які виникають в гетероструктурі в основному мають анізотропний характер і впливають на ширину забороненої зони, енергетичний спектр носіїв заряду і їх транспортні характеристики. Так, наприклад, в роботі [137], було встановлено, що в умовах одновісного стиску до 3.5 кбар, концентрація двовимірних (2D) електронів на гетеромежі $n\text{-GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ визначається в основному п'єзоелектричним полем, яке виникає вздовж напрямку [001], екранування якого призводить до збільшення концентрації 2D-

електронів на гетеромежі при стиску вздовж напрямку $[110]$ та до її зменшення при стиску вздовж $[1\bar{1}0]$. В роботі [138] було показано, що гідростатичний тиск до 20 кбар зміщує довжину хвилі лазерних діодів на основі InGaAsP/InP в червоний діапазон спектру на 200-250 нм.

Все вище згадане обумовлює важливість врахування деформаційних ефектів при розробці приладів на основі гетероструктур і, крім цього, може бути основою для створення принципово нових пристроїв, що базуються на самоузгоджених електрон-деформаційних ефектах в об'ємних напівпровідниках та гетероструктурах.

Зроблений аналіз літератури показує, що на даний час відсутня теорія самоорганізації дефектів з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії в напружених гетероструктурах, не досліджено вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування $n-n^+$ переходів у напівпровідникових матеріалах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами, не вивчено роль електрон-деформаційної взаємодії у просторовому перерозподілі електронів провідності у напружених гетероструктурах із домішками та власними точковими дефектами.

1.5. Висновки до розділу 1

1. Зроблений аналіз літератури показує, що на даний час відсутня теорія самоорганізації дефектів з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії в напружених гетероструктурах, не досліджено вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування $n-n^+$ переходів у напівпровідникових матеріалах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами, не вивчено роль електрон-деформаційної взаємодії у просторовому перерозподілі електронів провідності у напружених гетероструктурах із домішками та власними точковими дефектами.

2. Розроблено модель самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) у напівпровідниках під впливом імпульсного лазерного опромінення, яка враховує дифузію дефектів у неоднорідно-деформованому полі, створеного як наявністю самих дефектів, так і градієнтом температури та нелокальну взаємодію між дефектами та атомами матриці.
3. У межах розробленої моделі досліджено концентраційні профілі міжвузлових атомів та вакансій для Ge при різних значеннях їх середньої концентрації, температури підкладки та характерної відстані дії лазерного променя.
4. Показано, що міжвузлові атоми накопичуються біля опромінюваної поверхні напівпровідника, а вакансії – на відстані $(6 - 10) \text{ nm}$ від неї. Цей результат добре узгоджується із експериментальними даними. Оскільки міжвузлові атоми є центрами розтягу, а вакансії – стиску, то біля поверхні виникає неоднорідна деформація, яка призводить до локального зміщення дна зони провідності (вершини валентної зони) $\Delta E_{c(v)} = a_{c(v)} \epsilon$ ($a_{c(v)}$ – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності (валентної зони)) і, відповідно, до локалізації в різних областях напівпровідника носіїв різного типу і формування електронно-діркових переходів.
5. На основі порівняння концентраційних профілів міжвузлових атомів та вакансій із критичними значеннями концентрацій, при перевищенні яких відбуваються процеси самоорганізації, проаналізовано можливість формування нанокластерів дефектів у напівпровіднику Ge.

РОЗДІЛ 2. Деформація ґратки та просторовий перерозподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах

2.1. Вступ

Останнім часом широке використання у мікроелектронних приладах знайшли гетероструктури як з напруженими границями, так і без них. Відомо, що оптичні та електричні властивості напівпровідникових приладів на основі квантових ям значною мірою залежать як від деформації ґратки, так і від просторового розподілу точкових дефектів. Такі дефекти можуть проникати ззовні або виникати в процесі росту. Також у технології виготовлення оптоелектронних приладів відіграють важливу роль дифузійні процеси, які пов'язані із введенням домішок у напівпровідникову структуру.

Взаємодія дефектів з полем деформації, створеним як неузгодженням кристалічних ґраток контактуючих матеріалів, так і точковими дефектами, зумовлює просторовий перерозподіл останніх. Це може призвести як до накопичення, так і до зменшення числа дефектів у активній області в залежності від характеру деформації. Зокрема, відомо, що арсенід галію, вирощений методом молекулярно-пучкової епітаксії при низькій температурі, містить надлишок миш'яку [3, 47]. Впровадження надлишкового миш'яку спричиняє тетрагональне спотворення ґратки матеріалу GaAs і генерацію в ньому точкових дефектів: міжвузлових атомів (As), вакансій (Ga) та антиструктурних дефектів (As_{Ga}), що, в свою чергу, призводить до їх просторового перерозподілу. Деформація ґратки і концентрація генерованих точкових дефектів, які визначають фізичні властивості матеріалу, залежать від невідповідності параметрів ґраток контактуючих шарів

гетероструктури, температури росту, молекулярних потоків Ga і As, концентрації і хімічної природи легуючих домішок.

Напруження, зумовлені неузгодженням ґраток епітаксійного шару і підкладки, можуть бути пружними у випадку, коли товщина шару не перевищує певного критичного значення [139]. В іншому випадку відбувається утворення дислокацій невідповідності, що супроводжується різким погіршенням як оптичних, так і електричних характеристик приладів. Однак, в шарах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з неузгодженням меншим за критичне при певних умовах спостерігається значний спад рухливості та інтенсивності фотолюмінесценції [139], що пов'язано із збільшенням числа точкових дефектів та відповідним збільшенням дифузійного бар'єру для атомів третьої групи.

В експериментальній роботі [95] показано, що в гетероструктурі GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ напружені квантово-розмірні гетерошари затримують дифузію водню і дефектів в об'єм матеріалу, що призводить до істотної відмінності їх просторового розподілу в гетероструктурі та однорідних шарах.

Тому для створення приладів з наперед заданими фізичними властивостями виникає необхідність побудови теоретичної моделі, яка б описувала самоузгоджені дифузійно-деформаційні явища в гетероструктурах з власними точковими дефектами та домішками.

У цьому розділі на основі самоузгодженої системи рівнянь для параметра деформації та концентрації точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) створено модель самоузгоджених деформаційно-дифузійних явищ у напружених епітаксійних шарах та гетеросистемах. В межах цієї моделі:

- розраховано профіль розподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) та параметра деформації ґратки у напружених епітаксійних шарах InAs, вирощених на підкладці GaAs;
- розкрито закономірності стаціонарного перерозподілу домішок у напруженій тришаровій гетероструктурі;

- досліджено вплив невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів та концентрації домішок на їх коефіцієнт дифузії у напруженій тришаровій гетероструктурі;
- розраховано стаціонарний профіль параметра деформації у напруженій тришаровій гетероструктурі.

2.2. Модель самоузгоджених деформаційно-дифузійних явищ у напруженому епітаксійному шарі

Нехай в напруженому епітаксійному шарі, нарощеному на товстий підкладку ($h_s \gg h_0$, де h_s , h_0 – товщина підкладки та нарощуваного шару, відповідно), розподілені точкові дефекти (вакансії та міжвузлові атоми) з середньою концентрацією N_{d0} . За рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів підкладки та нарощуваного шару в останньому виникає деформація $\varepsilon(x)$. З віддаленням від гетеромежі у напрямі осі росту деформація ґратки моделюється експоненційною функцією:

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_0 e^{-\lambda x}, & x \geq 0; \\ 0, & x < 0, \end{cases} \quad (2.1)$$

де ε_0 – відносна зміна об'єму елементарної комірки нарощуваного шару на гетеромежі ($x = 0$):

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}, \\ \varepsilon_{yy} &= \varepsilon_{zz} = \frac{a_s - a_0}{a_s}, \\ \varepsilon_{xx} &= -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{yy}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

де ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{zz} – компоненти тензора деформації матеріалу епітаксійного шару;

a_s, a_0 – параметр ґратки підкладки та епітаксійного шару, відповідно;

C_{11}, C_{12} – пружні константи матеріалу епітаксійного шару;

γ – величина, обернена до ефективного радіуса екранування поля деформації, яка залежить як від пружних констант матеріалу, так і від середньої концентрації точкових дефектів.

Самоузгоджена взаємодія системи точкових дефектів з пружним середовищем епітаксійного шару призводить до перенормування деформації $\varepsilon(x)$ та просторового перерозподілу рухомих точкових дефектів із концентрацією $N_d(x)$.

У роботі [76] був записаний вираз для густини вільної енергії з врахуванням ангармонічних членів для напівпровідникового об'ємного матеріалу з точковими дефектами.

У даній задачі вираз для густини вільної енергії неоднорідного напруженого епітаксійного шару з точковими дефектами в напрямі осі росту в межах пружного континууму без врахування ангармонічних доданків представляємо у вигляді:

$$f = \frac{1}{2} \rho c_l^2 (U(x) - \varepsilon(x))^2 - \sum_{i=1}^2 \theta_{d_i} N_{d_i}(x) U(x) - \sum_{i=1}^2 \theta_{d_i} N_{d_i}(x) l_d^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} - TS, \quad (2.3)$$

де $U(x)$ – перенормована деформація епітаксійного шару; ρ – густина середовища; c_l – поздовжня швидкість звуку; $\theta_{d_i} = K \Delta \Omega_i$ – деформаційний потенціал; K – модуль всестороннього стиску; $\Delta \Omega_i$ – зміна об'єму кристалу при створенні одного дефекту; l_d – характерна довжина взаємодії дефектів з атомами структури; T – температура; S – ентропія системи; індекси $i = 1, 2$ відповідають міжвузловим атомам та вакансіям, відповідно.

Механічна напруга в епітаксійному шарі, створена як точковими дефектами, так і неузгодженням параметрів ґраток матеріалів епітаксійного шару та підкладки, має вигляд:

$$\sigma(x) = \frac{\partial f}{\partial U} = \rho c_l^2 U(x) - \sum_i \theta_{d_i} N_{d_i}(x) - \rho c_l^2 \varepsilon(x). \quad (2.4)$$

Використовуючи рівняння неперервності

$$\rho \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}, \quad (2.5)$$

запишемо рівняння для перенормованої деформації $U(x)$ у вигляді:

$$\frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} - \sum_i \frac{\theta_{d_i}}{\rho c_l^2} \frac{\partial^2 N_{d_i}(x)}{\partial x^2} - \gamma^2 \varepsilon_0 e^{-\gamma x}. \quad (2.6)$$

Оскільки дифузія дефектів відбувається в деформаційному полі, створеному як неузгодженням параметрів ґраток матеріалу підкладки та епітаксійного шару, так і просторовим перерозподілом точкових дефектів (міжвузлових атомів і вакансій), то на звичайний дифузійний потік

$$J_{di} = -D_{di} \frac{\partial N_i(x)}{\partial x},$$

який визначається тільки величиною і напрямом градієнта концентрації, накладається індукований деформаційний потік дефектів

$$j_{pi} = D_{di} \frac{\theta_{d_i}}{k_B T} N_{d_i}(x) \left(\frac{\partial U(x)}{\partial x} + l_d^2 \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \right).$$

Тоді рівняння для концентрації дефектів (міжвузлових атомів або вакансій) запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{d_i}(x)}{\partial t} = & D_{d_i} \frac{\partial^2 N_{d_i}(x)}{\partial x^2} - \\ & - D_{d_i} \frac{\theta_{d_i}}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left[N_{d_i}(x) \left(\frac{\partial U(x)}{\partial x} + l_d^2 \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \right) \right] + G_{d_i} - \frac{N_{d_i}(x)}{\tau_{d_i}}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

де D_{di} – коефіцієнт дифузії точкових дефектів; G_d – швидкість генерації дефектів; τ_d – час життя дефекта.

Нижче будемо розглядати стаціонарний стан такої дефектно-деформаційної (ДД) системи, тобто: $\frac{\partial N_d(x)}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial U(x)}{\partial t} = 0$.

Представимо деформацію ґратки і концентрацію дефектів у вигляді:

$$U(x) = U_0 + U_l(x), \quad (2.8)$$

$$N_d(x) = N_{d0} + N_{dl}(x), \quad (2.9)$$

Тут U_0 – просторово-усереднене значення деформації ґратки:

$$U_0 = \frac{1}{L} \int_0^L U(x) dx = \frac{\theta_d}{K} N_{d0}, \quad (2.10)$$

де L – товщина епітаксійного шару; $U_l(x)$ та $N_{dl}(x)$ – просторово неоднорідні складові деформації ґратки епітаксійного шару та концентрації точкових дефектів, відповідно.

Нехтуючи рекомбінацією дефектів ($\tau_d^{-1} = 0$), отримуємо зв'язану систему рівнянь для дифузії точкових дефектів та деформації епітаксійного шару:

$$\frac{\partial^2 N_{di}(x)}{\partial x^2} - \frac{\theta_{di}}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left[N_{di}(x) \left(\frac{\partial U_l(x)}{\partial x} + l_d^2 \frac{\partial^3 U_l(x)}{\partial x^3} \right) \right] = 0, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} - \sum_i \frac{\theta_{di}}{\rho c_l^2} \frac{\partial^2 N_{dli}(x)}{\partial x^2} - \gamma^2 \varepsilon_0 e^{-\gamma x} = 0. \quad (2.12)$$

Інтегруючи диференціальне рівняння (2.11), знаходимо розподіл концентрації точкових дефектів:

$$\begin{aligned} N_d(x) &= N_{d0} \exp \left(\frac{\theta_d}{k_B T} \left(U_l(x) + l_d^2 \frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} \right) \right) \approx \\ &\approx N_{d0} \left(1 + \frac{\theta_d}{k_B T} \left(U_l(x) + l_d^2 \frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Остання рівність має місце при умові:

$$\frac{\theta_d}{k_B T} \left(U_l(x) + l_d^2 \frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} \right) \ll 1. \quad (2.14)$$

Стала інтегрування вибрана з наступних міркувань. У випадку, якщо неоднорідна складова параметра деформації $U_l(x)$ дорівнює нулю, то концентрація точкових дефектів $N_d(x)$ повинна наближатися до свого просторово-однорідного значення N_{d0} .

2.3. Розрахунок параметра деформації та профілю розподілу точкових дефектів у напруженому епітаксійному шарі

У епітаксійному шарі містяться як міжвузлові атоми, так і вакансії, але, як правило, потенціал деформації міжвузлових атомів є набагато більшим за потенціал деформації вакансій ($\theta_{d_i} \gg \theta_{d_v}$) [76]. Тому в рівнянні для самоузгодженої деформації (2.6) знехтуємо внеском вакансій. Підставивши (2.13) в (2.12), отримаємо

$$\frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} - \frac{1}{d^2} U_l(x) = -\frac{N_{dc}}{N_{d0}} \frac{1}{l_d^2} \varepsilon_0 e^{-\kappa x}, \quad (2.15)$$

$$\text{де } d^2 = l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} \left(1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} \right), \quad N_{dc} = \frac{\rho c_l^2 k_B T}{\theta_d^2}.$$

Розв'язок рівняння (2.15) ($N_{d0} < N_{dc}$) із врахуванням додаткової умови

$$\int_0^\infty (N_d(x) - N_{d0}) dx = 0 \quad (2.16)$$

має вигляд

$$U_l(x) = \frac{N_{dc}}{N_{d0}} \frac{\varepsilon_0}{l_d^2} \frac{1}{\frac{1}{d^2} - \gamma^2} \left(e^{-\gamma x} - \frac{1 + l_d^2 \gamma^2}{\gamma d \left(1 + \frac{l_d^2}{d^2} \right)} e^{-\frac{x}{d}} \right). \quad (2.17)$$

З врахуванням (2.8) та (2.10) координатна залежність параметра деформації ґратки вздовж нарощуваного епітаксійного шару з точковими дефектами має вигляд:

$$U(x) = \frac{\theta_d}{K} N_{d0} + \frac{N_{dc}}{N_{d0}} \frac{\varepsilon_0}{l_d^2} \frac{1}{\frac{1}{d^2} - \gamma^2} \left(e^{-\gamma x} - \frac{1 + l_d^2 \gamma^2}{\gamma d \left(1 + \frac{l_d^2}{d^2} \right)} e^{-\frac{x}{d}} \right). \quad (2.18)$$

Параметр γ визначає швидкість зменшення деформації, що виникає за рахунок невідповідності параметрів ґраток матеріалів підкладки та нарощуваного шару, з віддаленням від гетеромежі, який знаходиться з умови мінімуму вільної енергії

$$\frac{\partial F}{\partial \gamma} = 0,$$

де $F = \int_V f(x) dV = S \int_0^\infty f(x) dx$ – вільна енергія епітаксійного шару об'ємом V ; S – площа поверхні нарощуваного шару.

З врахуванням параметра деформації $U_l(x)$ просторовий перерозподіл дефектів, зумовлений самоузгодженою взаємодією точкових дефектів з деформаційним полем, описується виразом:

$$N_d(x) = N_{d0} \left(1 + \frac{\theta_d}{kT} \left(\frac{N_{dc}}{N_{d0}} \frac{\varepsilon_0}{l_d^2} \frac{1}{\frac{1}{d^2} - \gamma^2} \left((1 + l_d^2 \gamma^2) e^{-\gamma x} - \frac{1 + l_d^2 \gamma^2}{\gamma d} e^{-\frac{x}{d}} \right) \right) \right). \quad (2.19)$$

В граничних випадках, коли $x \rightarrow \infty$, деформація (2.17) $U_l(x) \rightarrow 0$, а концентрація точкових дефектів наближається до просторово-

однорідного розподілу ($N_d(x) \rightarrow N_{d0}$ (2.19)). У випадку відсутності дефектів ($N_{d0} = 0$) в кристалі створюється деформація тільки за рахунок неузгодження параметрів кристалічних ґраток підкладки та епітаксійного шару ($U(x) = \varepsilon_0 e^{-\gamma x}$), а при відсутності неузгодження параметрів ґраток на гетеромежі ($\varepsilon_0 = 0$) деформація ($U = \frac{\theta_d}{K} N_{d0}$) зумовлена тільки точковими дефектами (формула (2.18)).

Числові розрахунки параметра деформації та просторового розподілу дефектів були проведені для системи InAs/GaAs [140]: $a_s^{\text{GaAs}} = 5.65 \text{ \AA}$; $a_0^{\text{InAs}} = 6.08 \text{ \AA}$; $C_{11} = 0.833 \text{ Мбар}$; $C_{12} = 0.453 \text{ Мбар}$; $\gamma = 0.045 \text{ \AA}^{-1}$; $l_d = 29 \text{ \AA}$; $T = 300 \text{ K}$; $\theta_d = 10 \text{ eB}$.

На рис.2.1, 2.2 представлено координатну залежність параметра деформації кристалічної ґратки $U(x)$ епітаксійного шару InAs та просторовий розподіл концентрації точкових дефектів (міжвузлових атомів) $\frac{N_d(x)}{N_{dc}}$ для середньої концентрації з діапазону $0 \leq N_{d0} \leq N_{dc}$. Як бачимо, такі залежності $U(x)$ та $\frac{N_d(x)}{N_{dc}}$ мають немонотонний характер із мінімумами, положення яких визначаються середньою концентрацією точкових дефектів N_{d0} .

При зростанні N_{d0} положення мінімумів концентрації міжвузлових атомів та деформації ґратки епітаксійного шару віддаляються від гетеромежі.

Таку поведінку $U(x) \left(\frac{N_d(x)}{N_{dc}} \right)$ якісно можна пояснити наступними міркуваннями. Як параметр деформації $U(x)$, так і просторовий перерозподіл точкових дефектів визначаються двома самоузгодженими конкуруючими факторами: складовою деформації, яка виникає за рахунок невідповідності параметрів ґраток підкладки та епітаксійного шару, та складовою деформації, індукованої за рахунок просторового перерозподілу точкових дефектів.

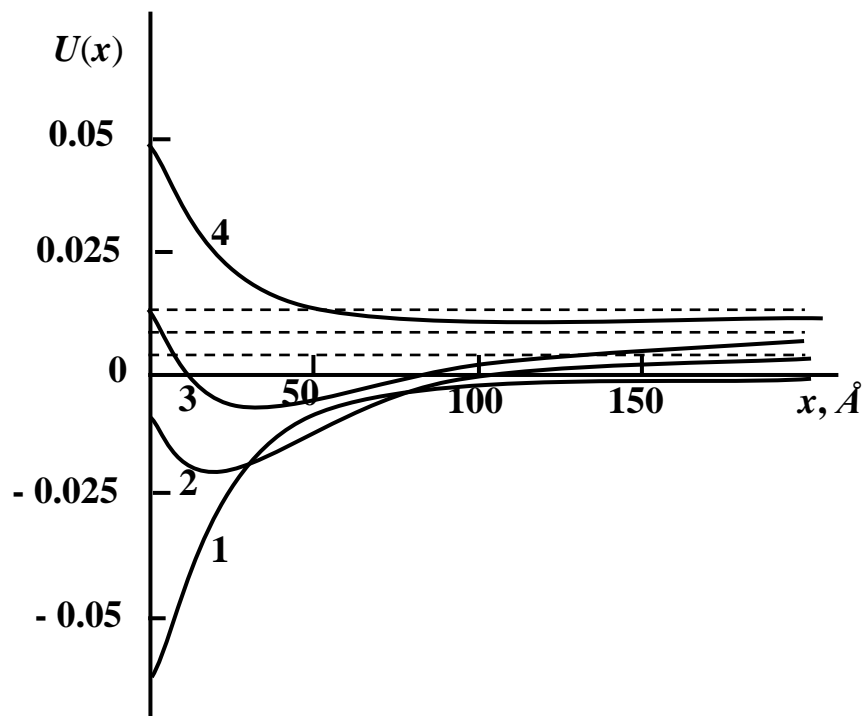


Рис.2.1. Координатна залежність параметра деформації епітаксійного шару за сімейством середніх значень концентрацій точкових дефектів ($\theta_d > 0$):

1 – $N_{d0} = 0$; **2** – $N_{d0} = 0.4N_{dc}$;

3 – $N_{d0} = 0.7N_{dc}$; **4** – $N_{d0} = 0.99N_{dc}$;

штрихові лінії відповідають просторово-однорідному значенню параметра деформації

Біля гетеромежі основну роль відіграє деформація стиску, зумовлена невідповідністю параметрів ґраток підкладки і епітаксійного шару, яка монотонно зменшується по абсолютній величині із віддаленням від гетеромежі (рис.2.1, крива 1). І тому в діапазоні $0 < x < 40 \text{ Å}$ спостерігається монотонне зменшення концентрації міжвузлових атомів. На відстані $x > 40 \text{ Å}$ основний внесок в деформацію нарощуваного шару InAs здійснює складова, що виникає за рахунок просторового перерозподілу точкових дефектів. Це призводить до збільшення деформації розтягу кристалічної ґратки епітаксійного шару

і, відповідно, до зростання концентрації міжвузлових атомів, яка наближається до відповідного середнього значення концентрації дефектів.

Існує такий діапазон концентрацій дефектів, при якій характер деформації ґратки епітаксійного шару (InAs) поблизу гетеромежі змінюється на протилежний: із стиску на розтяг. Це пояснюється тим, що нарощуваний шар поблизу гетеромежі ($0 < x < 25 \text{ \AA}$) збагачується міжвузловими атомами ($\theta_d > 0$, рис.2.2), що призводить до збільшення об'єму кристалічної ґратки у порівнянні із структурою без точкових дефектів (рис.2.1, крива 1). У стиснутих шарах ($a_s^{\text{GaAs}} < a_0^{\text{InAs}}$) міжвузлові атоми накопичуються поблизу границі і, навпаки, при віддалені від неї концентрація їх зменшується. Такий ефект спостерігався в експериментальних роботах [94, 95] по дослідженню спектрів фотолюмінісценції гетероструктур, де було показано, що напружені гетерошари GaAs/InGaAs затримують дифузію водню та дефектів в об'єм кристалу.

На рис.2.3, 2.4 приведено координатну залежність параметра деформації кристалічної ґратки вздовж осі росту епітаксійного шару InAs, який містить точкові дефекти – вакансії та домішки заміщення з ковалентним іонним радіусом меншим за іонний радіус атомів матриці ($\theta_d < 0$) та їх просторовий перерозподіл у самоузгодженому деформаційному полі.

У цьому випадку точкові дефекти (виду центрів стиску) накопичуються на відстані $x > 20 \text{ \AA}$ від гетеромежі, а поблизу неї спостерігається зменшення концентрації вакансій у порівнянні з їх просторово однорідним розподілом, що в кінцевому призводить до збільшення об'єму кристалічної ґратки у порівнянні із бездефектними шарами. В діапазоні середньої концентрації точкових дефектів $0.89N_{dc} < N_{d0} < N_{dc}$ характер деформації ґратки епітаксійного шару поблизу гетеромежі змінюється на протилежний: із стиску на розтяг (рис.2.3, крива 4).

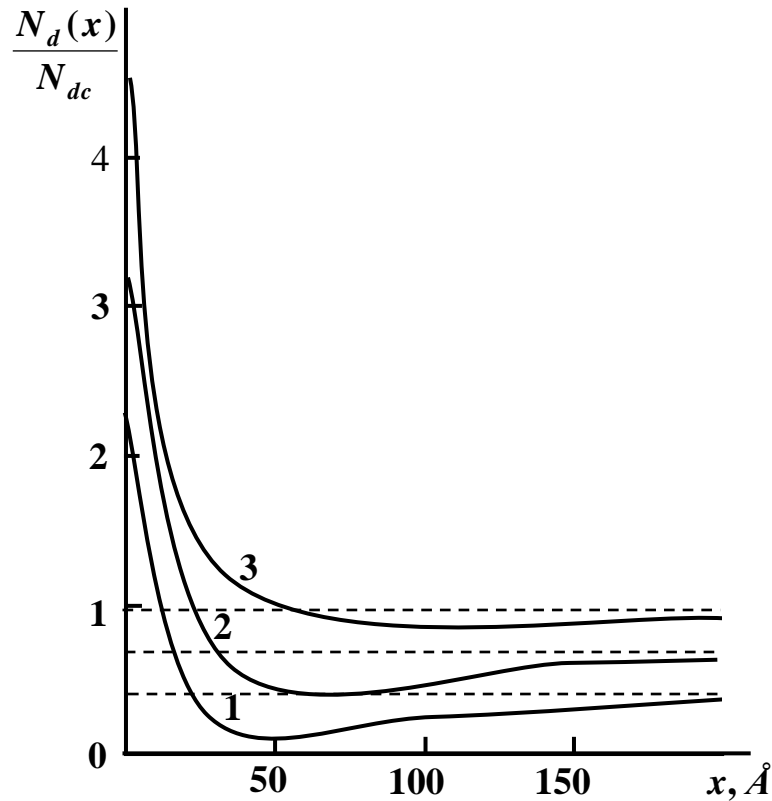


Рис.2.2. Просторовий перерозподіл точкових дефектів виду центрів розтягу ($\theta_d > 0$) при різних середніх значеннях концентрації дефектів:
1 – $N_{d0} = 0.4N_{dc}$; **2** – $N_{d0} = 0.7N_{dc}$; **3** – $N_{d0} = 0.99N_{dc}$;
 штрихові лінії відповідають просторово-однорідному значенню концентрації дефектів

У випадку, коли епітаксійний шар буде зазнавати деформації розтягу за рахунок неузгодження параметрів ґраток епітаксійного шару та підкладки ($a_s > a_0$, $\varepsilon_0 > 0$) спостерігатиметься зворотній ефект: поблизу гетеромежі буде спостерігатися зменшення концентрації міжвузлових атомів та накопичення вакансій. А це, в свою чергу, призведе до зменшення деформації розтягу в епітаксійному шарі біля гетеромежі.

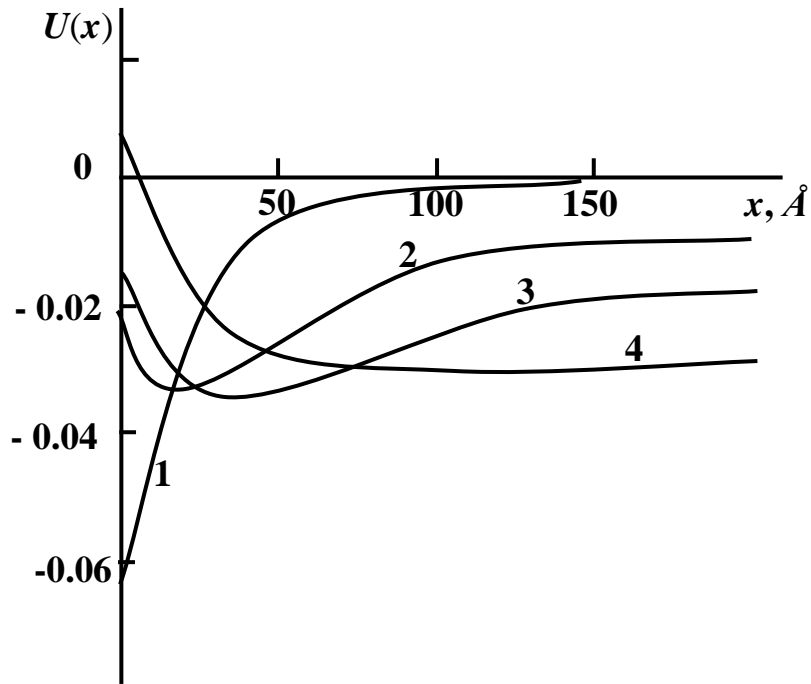


Рис.2.3. Координатна залежність параметра деформації епітаксійного шару за сімейством середніх значень концентрацій точкових дефектів ($\theta_d < 0$):
1 – $N_{d0} = 0$; **2** – $N_{d0} = 0.4N_{dc}$; **3** – $N_{d0} = 0.7N_{dc}$; **4** – $N_{d0} = 0.99N_{dc}$

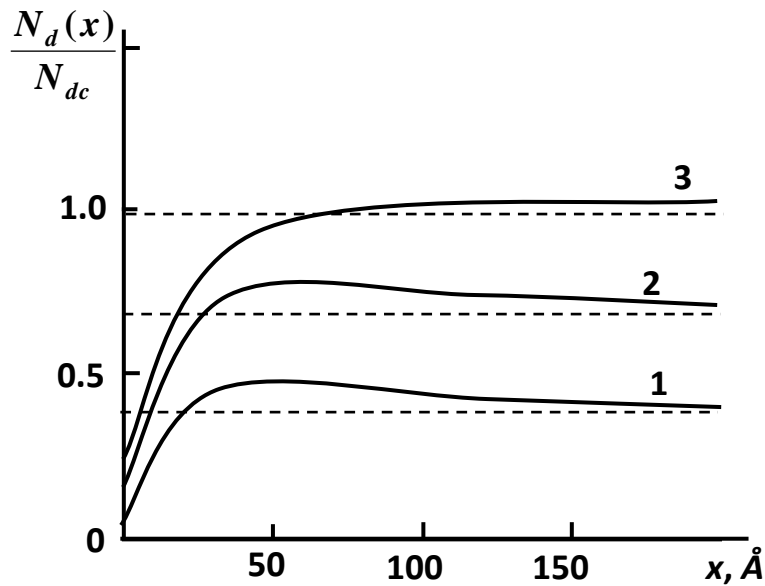


Рис.2.4. Просторовий перерозподіл точкових дефектів виду центрів стиску ($\theta_d < 0$) при різних середніх значеннях концентрації дефектів:
1 – $N_{d0} = 0.4N_{dc}$; **2** – $N_{d0} = 0.7N_{dc}$;
3 – $N_{d0} = 0.99N_{dc}$

2.4. Модель деформаційного перерозподілу домішок у тришарових гетеросистемах із напруженими шарами

Розглянемо напружену гетеросистему ABA , що складається з трьох шарів (рис.2.5) із середньою концентрацією домішок N_0 . У зв'язку з тим, що товщина шару A значно перевищує товщину внутрішнього шару B ($l \gg 2a$), можна знехтувати деформацією зовнішніх шарів A .

Механічна деформація у шарі B моделюється кусково-лінійною функцією

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \frac{|x|}{a}, \quad |x| \leq a. \quad (2.20)$$

Деформація, яка виникла за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих шарів A і B , описується такими компонентами тензора деформації:

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{||} = \frac{a_A - a_B}{a_B},$$

$$\varepsilon_{xx} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{yy},$$

де a_A і a_B – параметри ґраток відповідно шарів A і B .

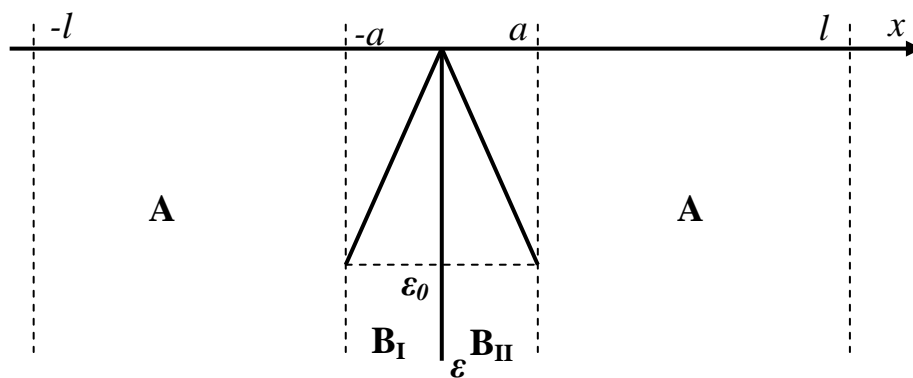


Рис. 2.5. Схема гетеросистеми ABA з механічно-деформованими шарами

Величина деформації на межі шарів А і В визначається як

$$\varepsilon_0 = 2\varepsilon_{||} + \varepsilon_{xx}. \quad (2.21)$$

В результаті самоузгодженої взаємодії домішок із деформаційним полем гетероструктури, яке створюється як за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і за рахунок наявності домішок, відбувається їх просторовий перерозподіл. В основі моделі покладемо модифіковане деформаційними ефектами значення потоку домішок [51]:

$$J = -\frac{\partial}{\partial x} \left[DN(x) \left(1 - \varepsilon(x) \frac{N_1}{N_b} \right) \right], \quad (2.22)$$

де D – коефіцієнт дифузії домішок, $N(x)$ – концентрація домішок, N_1 – концентрація атомів напівпровідникового матеріалу напруженого шару,

$$N_b = \frac{k_B T}{W} \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \frac{\rho}{r_1} N_1 \quad [48]. \quad (2.23)$$

(означення величин, що входять у формулу (2.23) приведені у підрозділі 1.3 розділу 1).

Потік дефектів у напруженій гетероструктурі складається з двох частин:

1) звичайного дифузійного (градієнтного) потоку $J_d = -D_{ef} \frac{\partial N(x)}{\partial x}$ з перенормованим коефіцієнтом дифузії D_{ef} внаслідок зміни ефективних розмірів дифузійних каналів під впливом напружень у гетероструктурі

$$D_{ef} = D \left[1 - \frac{N_1}{N_b} \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \varepsilon(x) dx \right]; \quad (2.24)$$

2) деформаційного потоку $J_p = D \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial \varepsilon(x)}{\partial x}$, який існує за рахунок пружних напружень.

Стаціонарний розподіл домішок у напруженій кристалічній системі ABA знаходиться шляхом розв'язання модифікованого механіко-деформаційними ефектами рівняння дифузії:

$$D_{ef} \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(DN(x) \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial \varepsilon(x)}{\partial x} \right) = 0, \quad (2.25)$$

Перепишемо рівняння (2.25) у вигляді

$$D_{ef} \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} - V \frac{\partial N}{\partial x} - DN(x) \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial^2 \varepsilon(x)}{\partial x^2} = 0, \quad (2.26)$$

де $V = D \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$ – швидкість домішок, отримана під дією градієнта

деформаційного поля, що виникає за рахунок неоднорідної деформації.

Розв'язок диференціального рівняння (2.26) знаходився у кожній області гетероструктури окремо. Області B_I і B_{II} відрізняються тим, що швидкість домішок під дією градієнта деформаційного поля має протилежний напрям. Це пов'язано з тим, що швидкість домішок, отримана у полі неоднорідної деформації, створеної як за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і наявністю домішок, є пропорційна градієнту деформації ($V \sim \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$).

На межах шарів гетероструктури ($x = -a$; $x = 0$; $x = a$) повинні виконуватись умови рівності концентрацій домішок, а також їх потоків:

$$\begin{aligned} N(-a-0) &= N(-a+0), & J(-a-0) &= J(-a+0), \\ N(0-) &= N(0+), & J(0-) &= J(0+), \\ N(a-0) &= N(a+0), & J(a-0) &= J(a+0). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Крім цього, вважаємо, що після вимкнення джерела імплантуючих домішок, потік крізь поверхні кристалічної системи відсутній (відбивні межі) [97]:

$$J(-l) = J(l) = 0. \quad (2.28)$$

При заданих умовах кількість домішок, що знаходиться в гетеросистемі, буде залишатись постійною, тобто повинна виконуватись умова

$$\int_{-l}^l N(x)dx = Q, \quad (2.29)$$

де Q – кількість домішок у кристалічній структурі, що припадає на одиницю площі поперечного перерізу; $2l$ – товщина гетероструктури.

У відповідному однорідному матеріалі при однакових фізичних умовах кількість домішок, що проникнуть у кристал за певний час імплантації, вважаємо рівною кількості домішок, що проникають за такий ж проміжок часу у гетероструктуру з напруженими шарами. Це твердження буде справедливим при виконанні наступної умови: $L_d \ll l$, де L_d – ефективна дифузійна довжина.

У стаціонарному випадку в результаті вільної дифузії (ненапружена гетероструктура) при заданих умовах домішки розподіляються рівномірно, тобто

$$Q = 2N_0l \quad (2.30)$$

Розв'язок диференціального рівняння (2.26), який задовільняє умовам (2.27–2.29), матиме вигляд:

$$\begin{aligned} N(x) &= \frac{N_0}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - \exp(\frac{ka}{l}))}, \quad |x| > a; \\ N(x) &= \frac{N_0}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - \exp(\frac{ka}{l}))} e^{\frac{k}{l}(x+a)}, \quad -a \leq x < 0; \\ N(x) &= \frac{N_0}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - \exp(\frac{ka}{l}))} e^{-\frac{k}{l}(x-a)}, \quad 0 \leq x \leq a, \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\text{де } k = -\text{sign} \varepsilon_0 \frac{|V|}{D_{ef}} l.$$

2.5. Просторовий перерозподіл домішок у напруженій гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs

Для ілюстрації висновків із запропонованої моделі деформаційного перерозподілу домішок у тришарових напружених гетероструктурах простежимо за впливом напруженого шару In_{0.2}Ga_{0.8}As на профіль стаціонарного розподілу домішок кремнію у гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs наступних розмірів: $a = 40 \text{ \AA}$; $l = 1 \text{ мкм}$.

Результати розрахунку координатної залежності концентрації домішок при різних значеннях параметра k представлені на рис.2.6. Помітно, що домішки накопичуються у стиснутому шарі In_{0.2}Ga_{0.8}As. У результаті такого перерозподілу концентрація імплантованих домішок у ненапруженій частині (GaAs) гетероструктури різко зменшується. І при великих значеннях параметра k їх концентрація може зменшуватися у 30 разів ($k = 85$) у порівнянні із ненапруженою структурою. Оскільки $k = \frac{|V|}{D_{ef}} l$, то очевидно, що здатність напружених шарів затримувати дифузію буде зростати зі зменшенням ефективного коефіцієнта дифузії D_{ef} . Це явище проявляється помітніше при значній зміні деформації з віддаленням від гетеромеж ($V \sim \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$), тобто значною мірою визначається пружними сталими контактуючих матеріалів гетероструктури та неузгодженням їх параметрів ґраток.

Наявність домішок ненульового об'єму Ω_i призводить до збільшення об'єму кристалу та перерозподілу механічних напружень гетероструктури. У найпростішому випадку ($\Omega_i = \Omega_0$, де Ω_0 – об'єм атома матриці) деформація кристалічної ґратки за рахунок наявності домішок ненульового об'єму визначається відношенням концентрації домішок до концентрації атомів матеріалу імплантованої матриці: $\varepsilon_1(x) = \frac{N(x)}{N_1}$. Тоді повну деформацію гетероструктури, спричинену як

неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і наявністю домішок, можна записати у вигляді

$$U(x) = \varepsilon(x) + \varepsilon_1(x) = \begin{cases} \varepsilon_0 \frac{|x|}{a} + \frac{N(x)}{N_1}, & |x| \leq a; \\ \frac{N(x)}{N_1}, & |x| > a. \end{cases} \quad (2.32)$$

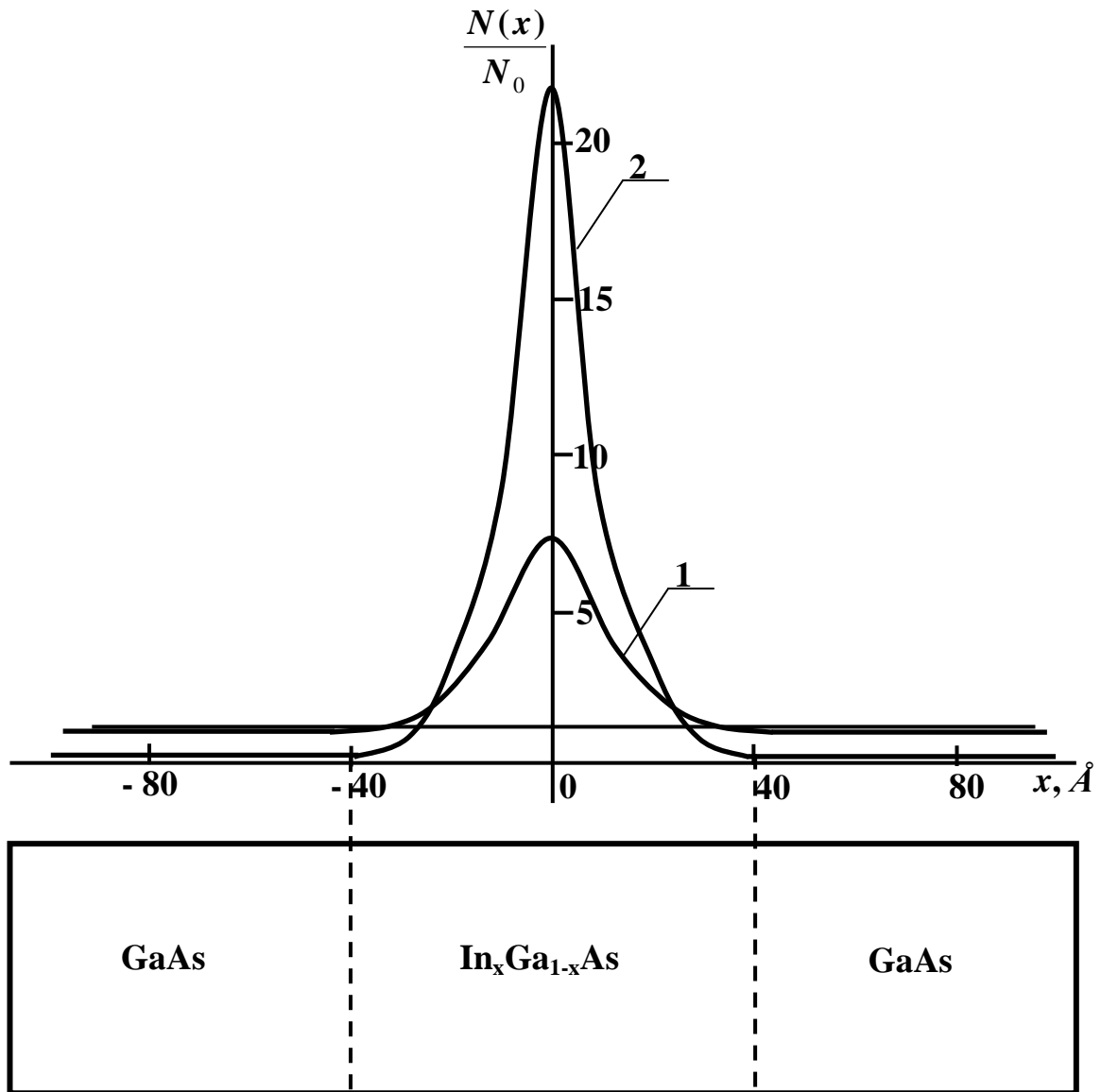


Рис.2.6. Перерозподіл концентрації домішок кремнію у гетероструктурі GaAs/ $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ /GaAs:

1 – $k = 50$; 2 – $k = 85$

На рис.2.7 представлено координатну залежність перенормованого параметра всебічної деформації $U(x)$ тришарової гетероструктури GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs при різних значеннях концентрації домішок. Характер деформації гетероструктури визначається двома факторами: розподілом домішок та невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми. Біля меж гетероструктури визначальним є другий фактор і, відповідно, напружений шар $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ зазнає деформації стиску. При віддаленні від гетеромежі зменшується вплив невідповідності параметрів ґраток контактуючих шарів, і тоді характер деформації гетероструктури визначається розподілом домішок. Причому при зростанні неузгодження параметрів кристалічних ґраток контактуючих матеріалів та швидкості зміни деформації з віддаленням від гетеромежі, яка визначається пружними сталими матеріалу, спостерігається збільшення деформації в центрі внутрішнього напруженого шару.

Для того, щоб дослідити вплив невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів на перерозподіл домішок у шарах гетероструктури

з деформацією розтягу ($\varepsilon_0 > 0$), проведемо відповідні розрахунки координатної залежності їх концентрації та повної деформації $U(x)$ матеріалу при від'ємних значеннях параметра k . Як бачимо з рис.2.8, у цьому випадку домішки практично не проникають у внутрішні напружені шари.

За рахунок цього концентрація імплантованих домішок у зовнішніх шарах гетероструктури несуттєво зростає у порівнянні з кристалічною системою без напружених шарів. Причому, при зростанні величини невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів тришарової гетероструктури (зростанні параметра k) спостерігається зменшення концентрації домішок у внутрішньому шарі. Такий характер стаціонарного розподілу імплантованих домішок можна пояснити на основі механіко-деформаційного механізму дифузії.

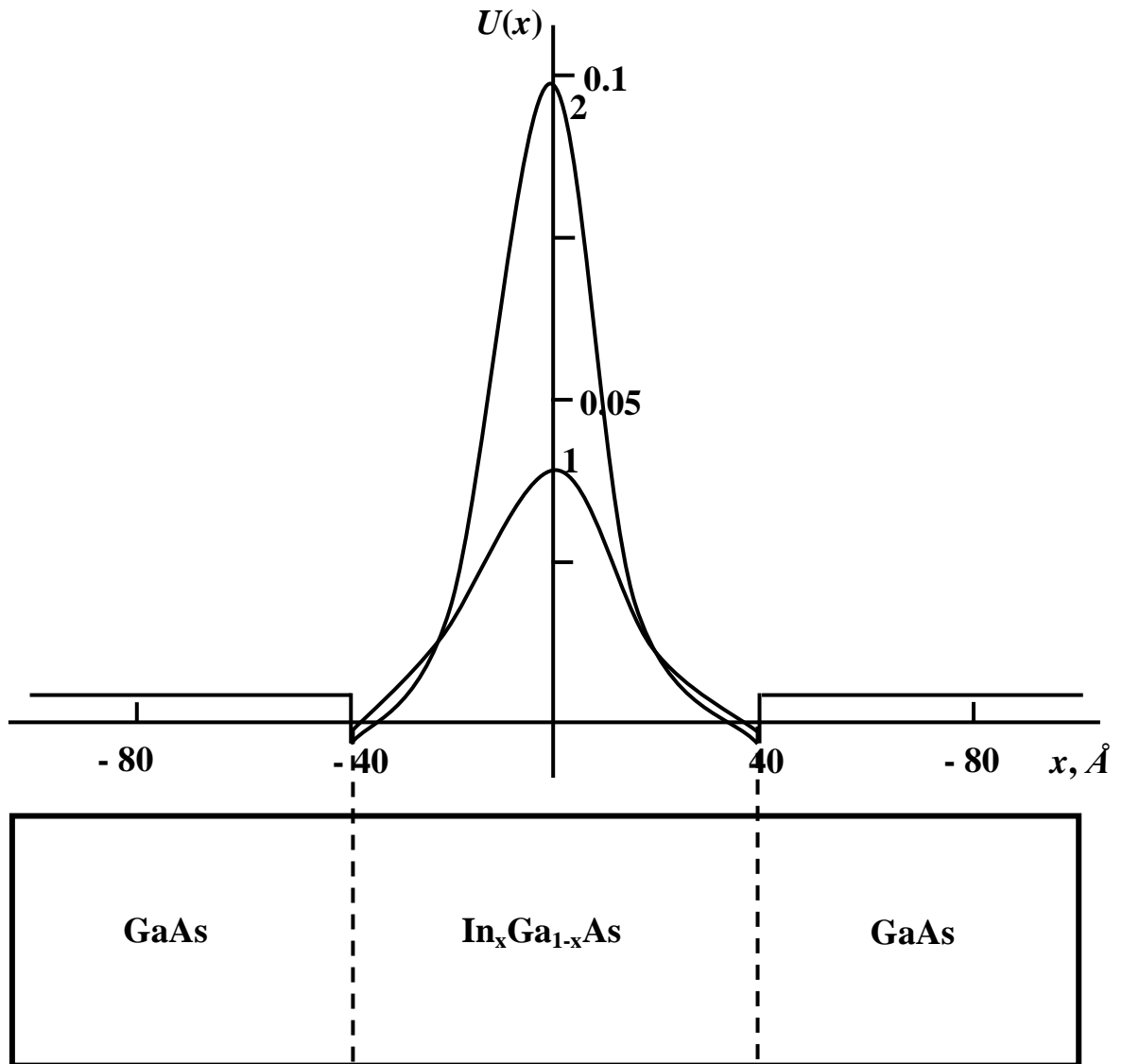


Рис.2.7 Координатна залежність параметра всебічної деформації гетероструктури GaAs/In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs із домішками кремнію:

1 – $k = 50$; **2** – $k = 85$

У напружених шарах, окрім звичайної градієнтної дифузії, суттєву роль відіграють дифузійні ефекти, індуковані деформаційним полем, яке існує в напруженій гетеросистемі. Деформаційний потік j_p , який виникає в такій гетеросистемі, пропорційний градієнту механічного напруження. За наявності стиснутих шарів ($\varepsilon_0 < 0$) у гетероструктурі цей потік сприяє накопиченню домішок у напружених шарах (рис.2.6).

У випадку всебічної деформації розтягу внутрішнього шару ($\varepsilon_0 > 0$), деформаційний потік призводить до переміщення домішок із менш неоднорідно-розтягнутої області внутрішнього шару (центру внутрішнього шару) до меж контактуючих матеріалів гетероструктури (рис.2.8).

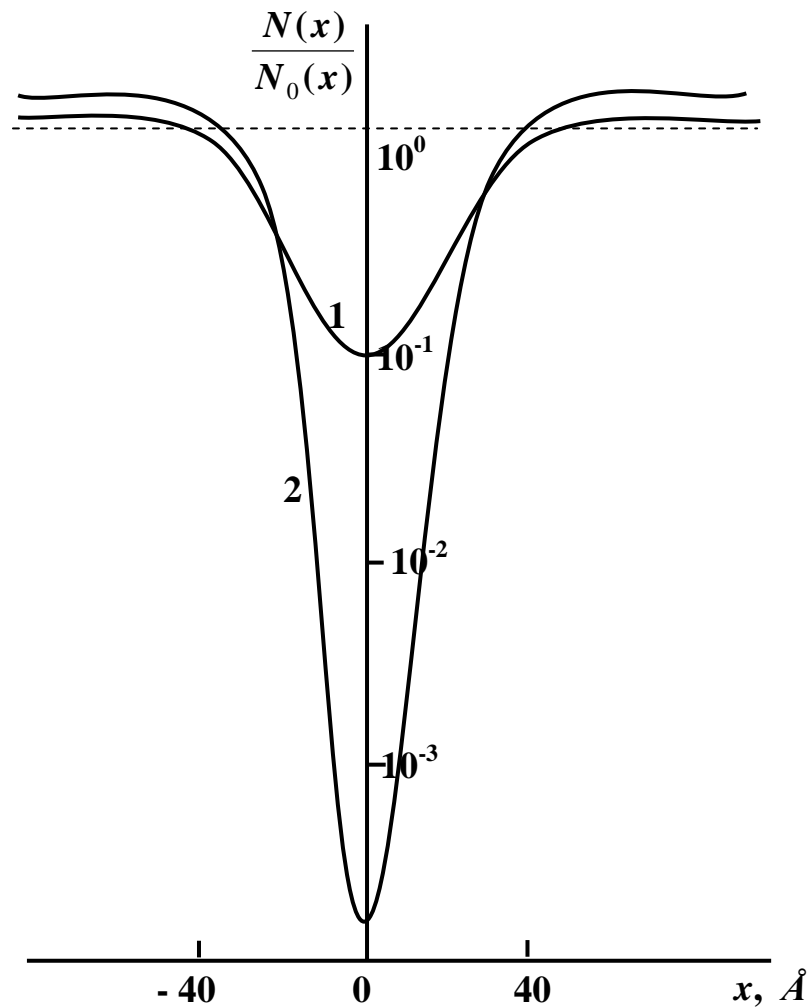


Рис.2.8. Перерозподіл концентрації домішок кремнію у гетероструктурі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ із напруженим шаром з деформацією розтягу:

$$1 - k = -50; \quad 2 - k = -85$$

На рис.2.9 представлена координатна залежність параметра всебічної деформації тришарової гетероструктури із розтягнутим внутрішнім шаром ($\varepsilon_0 > 0$) як з домішками (крива 1), так і без них (крива 2). Наявність домішок призводить до незначного зростання ($\sim 0,2\%$) величини деформації в зовнішніх шарах такої системи та у внутрішньому напруженому шарі поблизу гетеромежі. В основній частині внутрішнього шару, в якому виникає деформація розтягу, наявність домішок практично не впливає на характер деформації. Це можна пояснити тим, що в цій частині гетеросистеми концентрація домішок є незначною (рис.2.8) і характер деформації повністю визначається неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів *A* та *B*.

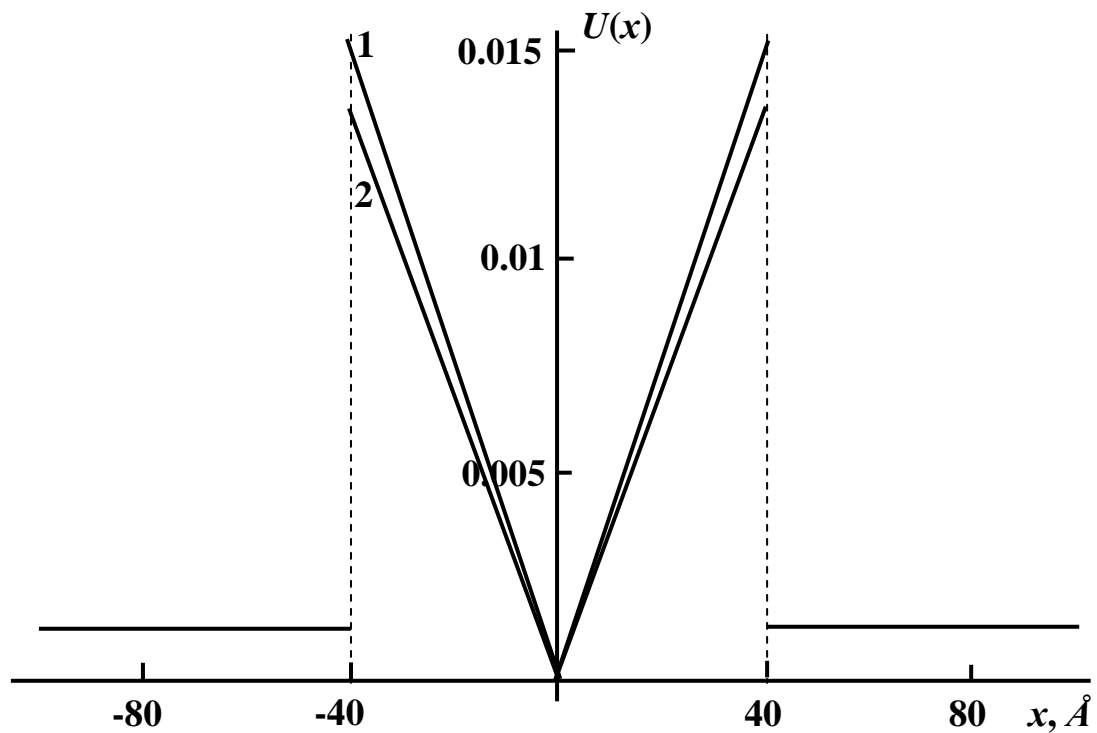


Рис.2.9. Координатна залежність параметра всебічної деформації гетероструктури із внутрішнім шаром з деформацією розтягу

$$\mathbf{1} - \frac{N_0}{N_1} = 0.001 \ (k = -220); \quad \mathbf{2} - \frac{N_0}{N_1} = 0$$

Напруження, які виникають в гетеросистемі як за рахунок невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і за рахунок наявності домішок, є причиною зміни ефективного розміру дифузійного каналу. Залежність коефіцієнта дифузії напруженої гетеросистеми від неузгодження параметрів ґраток та концентрації домішок визначається формулою (2.24). Підставивши перенормовану деформацію $U(x)$ (2.32) у формулу (2.24), отримаємо:

$$\frac{D_{ef}}{D} = 1 - \left(\frac{N_1}{N_b} \frac{\varepsilon_0}{2} + \frac{\eta \cdot \frac{l}{ka}}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - \exp(\frac{ka}{l}))} (e^{\frac{ka}{l}} - 1) \right), \quad (2.33)$$

де $\eta = \frac{N_0}{N_b}$.

На основі запропонованої моделі залежність коефіцієнта дифузії в напруженій гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs від складу її внутрішнього шару In_xGa_{1-x}As ($0 \leq x \leq 1$) в межах правила Вегарда [141, 142] матиме такий вигляд:

$$\varepsilon_0(x) = 2 \cdot \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \cdot \frac{a_A - a_B}{a_B} = \frac{2 \cdot (1 - \frac{C_{12}}{C_{11}})}{a_{B_0}} [a_{B_0}(1-x) + xa_{A_0} - a_{B_0}], \quad (2.34)$$

де a_{A_0} , a_{B_0} – параметри ґраток матеріалів GaAs і InAs, відповідно.

З врахуванням (2.34) формула (2.33) прийме вигляд:

$$\frac{D_{ef}(x)}{D} = 1 - \left[\frac{a}{l} \frac{k^*}{a_{B_0}} [a_{B_0}(1-x) + xa_{A_0} - a_{B_0}] + \right.$$

$$+ \frac{\frac{k^*}{a_{B_0}} [a_{B_0}(1-x) + xa_{A_0} - a_{B_0}] \cdot a}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{\frac{k^*}{a_{B_0}} [a_{B_0}(1-x) + xa_{A_0} - a_{B_0}]}} \cdot \left(\exp \left(\frac{\frac{k^*}{a_{B_0}} [a_{B_0}(1-x) + xa_{A_0} - a_{B_0}] a}{l} \right) - 1 \right) \right], \quad (2.35)$$

$$\text{де } k^* = (1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}) \frac{N_1}{N_b} \frac{l}{a}.$$

На рис.2.10 представлено результати розрахунку залежності коефіцієнта дифузії домішок кремнію в гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs від складу її внутрішнього шару або від величини невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів при різних значеннях середньої концентрації домішок по відношенню до коефіцієнта вільної дифузії.

При незначній концентрації домішок ($\eta = 10^{-8}$, $N_0 = 10^{13} \text{ см}^{-3}$) із зростанням величини невідповідності ґраток гетероструктури коефіцієнт дифузії D_{ef} лінійно зростає. Його зміна по відношенню до коефіцієнта вільної дифузії D не перевищує 3%. Подальше зростання середньої концентрації домішок призводить до монотонного зменшення коефіцієнта дифузії. Причому, з ростом невідповідності параметрів ґраток (з ростом долі In у шарі In_xGa_{1-x}As) коефіцієнт дифузії в напруженій гетероструктурі також зменшується. Зокрема, при середній концентрації домішок кремнію $N_0 = 1.5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ($\eta = 0.015$) коефіцієнт дифузії гетеросистеми зменшується на 35% ($x = 1$) у порівнянні з коефіцієнтом вільної дифузії. При незначних концентраціях домішок деформація структури в основному визначається складовою, що виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток шарів **B** (In_xGa_{1-x}As) та **A** (GaAs). В цьому випадку зростання долі In у шарі In_xGa_{1-x}As

призводить до зростання деформації стиску внутрішнього шару $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ за абсолютною величиною і, відповідно, до зменшення часу між двома зіткненнями домішок, що і є причиною збільшення коефіцієнта дифузії (рис.2.10, лінія 1).

При зростанні середньої концентрації домішок характер деформації матеріалу гетероструктури основним чином визначається перерозподілом домішок. В цьому випадку збільшення невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів призводить до накопичення домішок у внутрішньому шарі (рис.2.6) і, відповідно, до збільшення деформації розтягу.

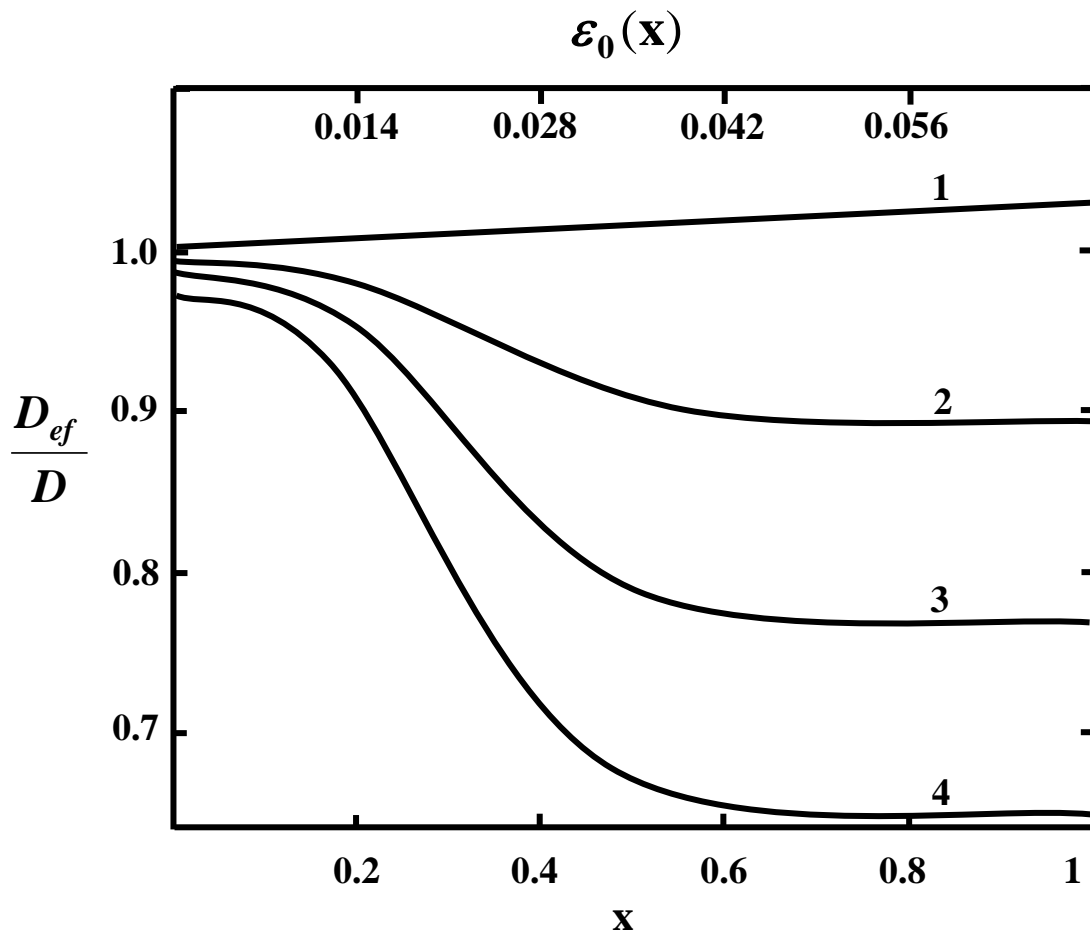


Рис.2.10. Залежність коефіцієнта дифузії кремнію у внутрішньому шарі гетероструктури $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ від складу твердого розчину при різних значеннях середньої концентрації домішок ($k^* = 2700$):

1 – $\eta = 10^{-8}$; 2 – $\eta = 0.005$; 3 – $\eta = 0.01$; 4 – $\eta = 0.015$

Як було зазначено в роботі [143], напруження розтягу збільшує потенціальний бар'єр для дифузії. Збільшення концентрації домішок у внутрішньому напруженому шарі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ тришарової гетероструктури $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ призводить до зменшення відстані між двома положеннями рівноваги (відстань між вузлами або міжвузлями), що і є причиною зменшення коефіцієнта дифузії (рис.2.10) [97].

У випадку, коли внутрішній шар зазнає всебічної деформації розтягу ($\varepsilon_0 > 0$), спостерігається незначне (до 3%) монотонне зменшення коефіцієнта дифузії домішок як при збільшенні їх концентрації, так і при зростанні неузгодження параметрів кристалічних ґраток контактуючих шарів (рис.2.11).

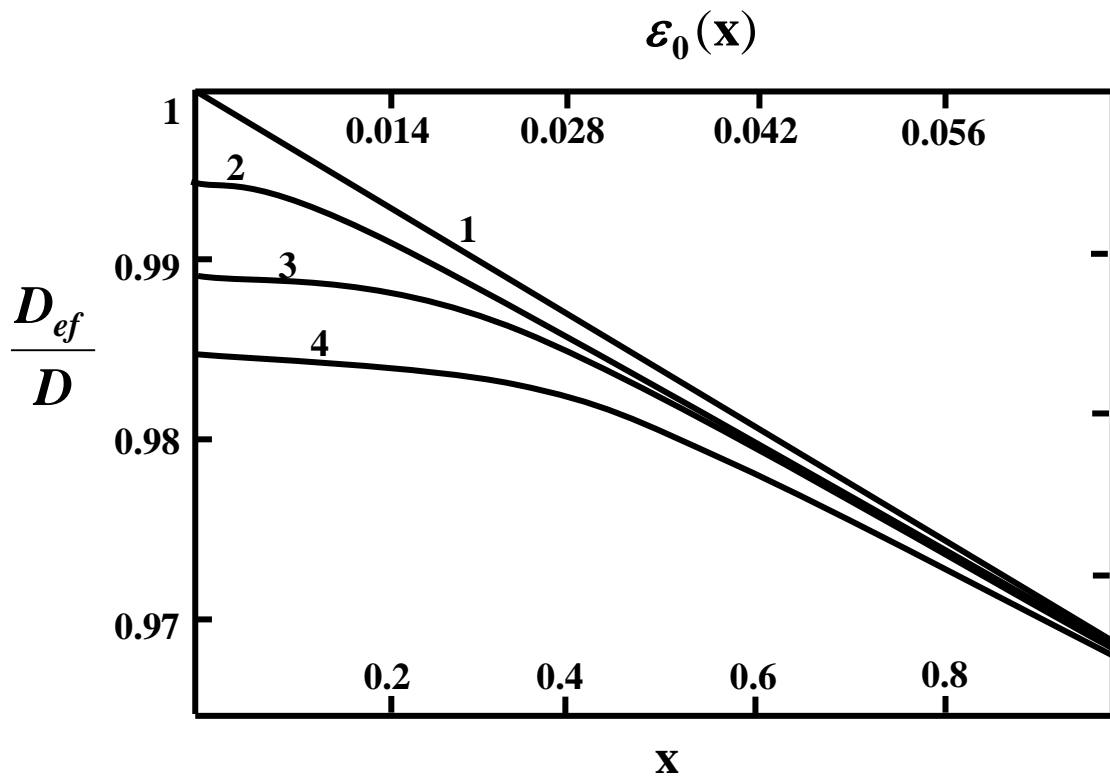


Рис.2.11. Залежність коефіцієнта дифузії кремнію в гетероструктурі з внутрішнім шаром із деформацією розтягу

при різних значеннях середньої концентрації домішок ($k^* = 2700$):

1 – $\eta = 10^{-8}$; 2 – $\eta = 0.005$; 3 – $\eta = 0.01$; 4 – $\eta = 0.015$

Така поведінка коефіцієнта дифузії пояснюється тим, що наявність домішок практично не змінює величини деформації внутрішнього розтягнутого шару тришарової гетероструктури (рис.2.9) і, відповідно, несуттєво зменшується коефіцієнт дифузії в напруженій структурі [139] з внутрішнім шаром, який зазнає всебічної деформації розтягу.

2.6. Висновки до розділу 2

1. Встановлено, що координатна залежність параметра деформації $U(x)$ та концентраційний профіль $N_d(x)$ розподілу міжвузлових атомів (вакансій) вздовж осі росту напруженого епітаксійного шару InAs мають немонотонний характер із мінімумами (максимумами), положення яких визначаються середньою концентрацією точкових дефектів N_{d0} . При зростанні N_{d0} положення мінімумів (максимумів) віддаляються від гетеромежі.
2. Показано, що у напруженому епітаксійному шарі InAs, вирощеному на підкладці GaAs, в результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу міжвузлові атоми накопичуються поблизу гетеромежі ($0 < x < 25 \text{ Å}$), а вакансії – на відстані $x > 25 \text{ Å}$ від гетеромежі.
3. Встановлено, що у стиснутому шарі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.2$) тришарової гетероструктури GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs концентрація домішок зростає на порядок, що призводить до їх зменшення у ненапружених шарах (GaAs) у порівнянні з просторово-однорідним розподілом. Такий характер стаціонарного розподілу імплантованих домішок зумовлений дією двох конкуруючих ефектів: звичайною градієнтною дифузією та індукованою деформацією матеріалу гетероструктури.
4. Встановлено, що у напружених шарах гетероструктури з деформацією розтягу концентрація домішок зменшується в $10 - 10^3$ разів в залежності від величини неузгодження постійних ґраток

контактуючих матеріалів і, відповідно, збільшується в ненапруженій її частині у порівнянні з просторово-однорідним розподілом домішок. Це можна пояснити тим, що деформаційний потік, який пропорційний градієнту механічного напруження, виштовхує домішки у недеформовану частину кристалу.

5. Показано, що наявність домішок виду центру розтягу у внутрішньому стиснутому шарі ($\varepsilon_0 < 0$) гетероструктури GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs призводить до зміни знаку деформації, тобто до розтягу цього шару. При збільшенні невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів зростає всебічна деформація розтягу матеріалу гетеросистеми.
6. Досліджено, що наявність домішок виду центру розтягу в тришаровій гетеросистемі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з напруженням розтягу у внутрішньому шарі практично не змінює характеру деформації. Це можна пояснити тим, що у внутрішньому шарі тришарової структури значно зменшується концентрація домішок і величина параметра деформації практично визначається тільки невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів.
7. Встановлено, що із збільшенням невідповідності параметрів ґраток на 7% ($x = 1$) коефіцієнт дифузії домішок у внутрішньому шарі гетероструктури GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з деформацією стиску зменшується на 35%. Таку поведінку коефіцієнта дифузії можна пояснити зростанням концентрації домішок і відповідним збільшенням величини деформації розтягу, що призводить до збільшення потенціального бар'єру для дифузії.
8. Встановлено, що у тришаровій гетероструктурі із внутрішнім розтягнутим шаром, наявність домішок практично не змінює значення коефіцієнта дифузії у порівнянні з бездомішковою кристалічною системою. Це зумовлено тим, що імплантація домішок виду центру розтягу практично не змінює величини параметра деформації внутрішнього напруженого шару.

РОЗДІЛ 3. Нелінійна модель формування $n-n^+$ переходів у широкозонних напівпровідникових кристалах з точковими дефектами з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії

3.1. Вступ

Опромінення напівпровідникових структур нейтронами, α -частинками, осколками ділення ядер, γ -квантами, а також лазерне опромінення призводить до виникнення точкових дефектів – міжвузлових атомів та вакансій [1, 57-60]. Крім цього, такі дефекти можуть виникати в процесі росту напівпровідникових сполук, який супроводжується захопленням з надлишком одного з компонентів сполуки. Нелінійна взаємодія точкових дефектів кристалу із самоузгодженим полем механічної деформації, зумовленої наявністю точкових дефектів, призводить до утворення впорядкованих дефектно-деформаційних (ДД) структур: кластерів і періодичних структур [9, 76]. Зокрема, в роботі [76] в межах моделі пружного континууму без врахування електрон-деформаційної взаємодії розвинута теорія утворення ієрархії стаціонарних одновимірних ДД-структур в опроміненому кристалі. Показано, що в залежності від величини перевищення просторово-однорідної концентрації дефектів N_{d0} відповідних порогових значень, спочатку утворюються стаціонарні локалізовані ДД-мезоструктури, а потім періодичні мезоструктури.

Крім цього, розвиток технологій іонного легування вимагає точного теоретичного розрахунку профілів розподілу введеної домішки по глибині кристалу.

Специфічні особливості дифузії в напівпровідниках значною мірою визначаються взаємодією імплантованих домішок та дефектів ґратки (міжвузлових атомів та вакансій) з електронною підсистемою. Ця взаємодія проявляється, по-перше, у зміні концентрації дефектів, по-

друге, у перерозподілі електронів провідності та зміні концентраційного профілю імпантованих домішок, по-третє, в існуванні внутрішнього електричного поля, створеного нерівномірно розподіленими домішковими іонами та електронами провідності.

Тому, поряд з інформацією про просторовий розподіл точкових дефектів та імпантованих домішок, не менш важливою є інформація про самоузгоджений перерозподіл електронної густини та профіль електростатичного потенціалу в напівпровідникових матеріалах.

В третьому розділі методом самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку [120-122] розв'язано наступні задачі:

- в межах нелінійної моделі розвинуто теорію утворення $n-n^+$ переходів у широкозонних напівпровідниках (GaAs, ZnTe, CdTe) із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії;
- розраховано електростатичний потенціал у широкозонних напівпровідниках A^3B^5 , A^2B^6 із самоорганізованими ДД-структурами при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів;
- встановлено критерії виникнення $n-n^+$ переходів у напівпровідникових широкозонних кристалах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів;
- досліджено вплив електрон-деформаційної взаємодії на параметр деформації напівпровідникового матеріалу GaAs з дефектно-деформаційними структурами легованого кремнієм;
- досліджено вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування $n-n^+$ переходів у імпантованій домішками Si кристалічній матриці GaAs;
- розраховано електрон-деформаційну складову параметра деформації в імпантованій кремнієм кристалічній матриці GaAs.

3.2. Гамільтоніан кристалу із самоорганізованими ДД-структурами з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії

Нехай в кристалі розподілені точкові дефекти з середньою концентрацією N_{d0} . Гамільтоніан цієї системи з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії має вигляд [143]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i\sigma} S U(x_i) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{ij} \sum_{\sigma} \lambda_{ij}^0 c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \rho c_i^2 \Omega_0 U^2(x_i) + \\ & + \frac{1}{3} \sum_i \rho c_i^2 \Omega_0 \alpha U^3(x_i) + \frac{1}{4} \sum_i \rho c_i^2 \Omega_0 \beta U^4(x_i) + \sum_i \rho c_i^2 l_0^2 \Omega_0 \frac{\partial^2 U(x_i)}{\partial x_i^2} U(x_i) - \\ & - \sum_i \theta_d l_d^2 N_d(x_i) \Omega_0 \frac{\partial^2 U(x_i)}{\partial x_i^2} - \sum_i \theta_d N_d(x_i) \Omega_0 U(x_i) + \hat{H}_{кул}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

де S – константа деформаційного потенціалу зони провідності; $c_{i\sigma}^+$ ($c_{i\sigma}$) – фермі-оператори народження (знищення) електронів із спіном σ в локалізованому стані Ваньє на вузлі i ; λ_{ij}^0 – інтеграли переносу в зоні провідності в недеформованій кристалічній ґратці; Ω_0 – об'єм елементарної комірки; $\hat{H}_{кул}$ – енергія кулонівської взаємодії між електронами; l_0 – характеристична довжина взаємодії атомів один з одним; α, β – константи пружного ангармонізму [76].

В першому доданку (3.1) враховано зсув електронного рівня на i -му вузлі за рахунок деформації $U(x_i)$. Зміну інтегралу переносу λ_{ij}^0 , який визначається ступінню електронного перекриття i -го та j -го вузлів, що впливає на зміну ширини електронної зони, враховано в другому доданку. Крім цього, враховано наявність пружної енергії дефектного кристалу з врахуванням ангармонічних членів (третій, четвертий, п'ятий доданки), взаємодію атомів ґратки один з одним (шостий доданок) та з дефектами (сьомий доданок), потенціальну енергію взаємодії дефектів з деформацією ґратки (восьмий доданок) та енергію електростатичної взаємодії між зарядами.

З умови механічної рівноваги

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial U(x_i)} \right\rangle = \sigma(x)V, \quad (3.2)$$

де V – об’єм кристалу, було знайдено вираз для напруження $\sigma(x)$ дефектної структури з врахуванням ангармонічних доданків та електрон-деформаційної взаємодії

$$\begin{aligned} \sigma(x) = & S n(x) + \rho c_l^2 U(x) - \rho c_l^2 |\alpha| U^2(x) + \rho c_l^2 \beta U^3(x) + \\ & + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} - \theta_d N_d(x), \end{aligned} \quad (3.3)$$

де $n(x) = \sum_{kk'} \langle c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle e^{-i(k-k')x}$ – просторовий розподіл концентрації електронів провідності в неоднорідно-деформованій кристалічній системі; $\langle c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle$ – електронна кореляційна функція [145].

3.3. Розв’язання системи нелінійних диференціальних рівнянь для параметра деформації та концентрації дефектів

З врахуванням (3.3) та рівняння неперервності (2.5) рівняння для деформації записується у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U(x)}{\partial t^2} = & \frac{S}{\rho} \frac{\partial^2 n(x)}{\partial x^2} + c_l^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^4 U(x)}{\partial x^4} - c_l^2 |\alpha| \frac{\partial^2 (U^2(x))}{\partial x^2} + \\ & + c_l^2 \beta \frac{\partial^2 (U^3(x))}{\partial x^2} - \frac{\theta_d}{\rho} \frac{\partial^2 N_d(x)}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для знаходження параметра деформації кристалічної ґратки та концентрації точкових дефектів необхідно самоузгоджено розв’язати зв’язану систему рівнянь (2.7) та (3.4).

У стаціонарному випадку з врахуванням (2.8), (2.9) та (2.13) отримуємо наступне нелінійне рівняння для просторово-неоднорідної складової деформації $U_l(x)$:

$$\frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} - aU_l(x) + fU_l^2(x) - cU_l^3(x) - p \frac{S}{\rho c_l^2} \Delta n(x) = 0, \quad (3.5)$$

$$\text{де } a = \frac{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}}}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; \quad f = \frac{|\alpha|}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; \quad c = \frac{\beta}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2} \quad [60]; \quad p = \frac{1}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2};$$

$$N_{dc} = \frac{\rho c_l^2 k_B T}{\theta_d^2} - \text{критична концентрація дефектів.}$$

У результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу точкових дефектів у кристалі виникає неоднорідна деформація. Наявність такої деформації у напівпровіднику з точковими дефектами внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до локальної зміни зонного спектру і, відповідно, до просторового перерозподілу електронів провідності $\Delta n(x)$ та виникнення електростатичного потенціалу $\phi(x)$ в околі деформаційно-дефектних структур [120, 122].

Для знаходження зміни концентрації електронів провідності $\Delta n(x)$ та електростатичного потенціалу $\phi(x)$ розв'язувалась самоузгоджена система наступних рівнянь:

1) стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\left[\nabla_x^2 - \frac{W}{\alpha^*} + \frac{e}{\alpha^*} \phi(x) \right] \Psi_n(x) = -\frac{1}{\alpha^*} (\lambda_n - \lambda_0) \Psi_n(x), \quad (3.6)$$

де $W(x) = SU(x)$ – деформаційний потенціал; $\alpha^* = \frac{\hbar^2}{2m^*}$; m^* – ефективна

маса електронів; λ_0 – енергія дна зони провідності в недеформованій кристалічній матриці; λ_n – власні значення оператора Шредінгера

$$\nabla_x^2 - \frac{S}{\alpha^*} U(x) + \frac{e}{\alpha^*} \phi(x);$$

2) рівняння, яке визначає концентрацію електронів $n(x)$

$$n(x) = \sum_n \frac{\Psi_n^*(x) \Psi_n(x)}{\exp(\beta_0 (\tilde{\lambda}_n - \mu)) + 1}, \quad (3.7)$$

де $\tilde{\lambda}_n = \lambda_n - \lambda_0$; $\beta_0 = \frac{1}{k_B T}$; μ – хімічний потенціал;

3) рівняння Пуассона, з якого визначається електростатичний потенціал $\varphi(x)$

$$\nabla^2 \varphi(x) = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} \Delta n(x), \quad (3.8)$$

4) рівняння для знаходження хімічного потенціалу

$$\frac{\Omega_0}{V} \int_V n(x) dV = \bar{n}, \quad 0 \leq \bar{n} \leq 2, \quad (3.9)$$

де $\bar{n} = n_0 \Omega_0$ – задана середня кількість електронів на одному вузлі; n_0 – середня концентрація електронів.

В даній задачі розглядаються напівпровідникові кристали із значною концентрацією електронів провідності (леговані напівпровідники n -типу $n = 10^{17} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$). За таких умов перерозподіл електронів провідності у результаті зсуву і локальної зміни ширини зони провідності при неоднорідній деформації призводить до значного накопичення електричного заряду і енергія електростатичної взаємодії стає того ж порядку, що й деформаційна енергія SU [122], тобто $e|\varphi| \sim SU$. В цьому випадку добрим наближенням розв'язком рівняння Шредінгера (3.6) є хвильова функція у вигляді плоскої хвилі.

У лінійному наближенні зміна концентрації електронів провідності $\Delta n(x)$ в околі самоорганізованого кластера визначається співвідношенням [122]

$$\Delta n(x) = R_S (e\varphi(x) - SU(x)), \quad (3.10)$$

$$\text{де } R_S = \left(\frac{3}{8}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\pi^{\frac{4}{3}} \alpha^*} \frac{(n_0 \Omega_0)^{\frac{1}{3}} \left[1 + \frac{S^2 (n_0 \Omega_0)^{\frac{1}{3}}}{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \alpha^* K} \right]^{\frac{1}{2}}}{1 - \left(\frac{3}{8}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\pi^{\frac{4}{3}} \alpha^*} \frac{S^2 (n_0 \Omega_0)^{\frac{1}{3}}}{\alpha^* K} \left[1 + \frac{S^2 (n_0 \Omega_0)^{\frac{1}{3}}}{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \alpha^* K} \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.11)$$

Із врахуванням (3.10) рівняння для деформації (3.5) та рівняння Пуассона (3.8) набувають вигляду

$$\frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} - \tilde{a}U_l + fU_l^2 - cU_l^3 = p \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2} \frac{e\varphi}{S}, \quad (3.12)$$

$$\Delta\varphi(x) - g_s^2\varphi(x) = - \frac{Sg_s^2}{e}U_l(x), \quad (3.13)$$

де $\sqrt{\tilde{a}} = \sqrt{a - p \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2}}$ – обернена величина до ефективного розміру кластера; g_s – обернена величина до радіуса екранування електростатичного потенціалу:

$$g_s^2 = \frac{e^2 R_s}{\varepsilon \varepsilon_0}. \quad (3.14)$$

Система рівнянь (2.11), (3.10), (3.12) та (3.13) має просторово-однорідний розв'язок: $N_d(x) = N_{d0}$, $\Delta n(x) = 0$, $U_l(x) = 0$, $\varphi(x) = 0$. Якщо параметр N_{d0} перевищує певне критичне значення концентрації точкових дефектів, тоді просторово-однорідний розв'язок стає нестійким і дефектно-деформаційна система напівпровідника переходить в інший просторово-неоднорідний стійкий стаціонарний стан.

При неврахуванні електрон-деформаційної взаємодії ($n_0 = 0$) рівняння для неоднорідної складової параметра деформації (3.12) співпадає з рівнянням (11а) у роботі [76]:

$$\frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} - aU_l + fU_l^2 - cU_l^3 = 0. \quad (3.15)$$

Система рівнянь (3.12), (3.13) розв'язувалась методом послідовних наближень. В якості першого наближення вираз для неоднорідної деформації $U_l(x)$ знаходився при $n_0 = 0$ ($R_s = 0$), тобто без врахування електрон-деформаційної взаємодії. Тоді, в першому наближенні вираз для самоузгодженої деформації кристалічної ґратки $U_{ol}(x)$ з просторовим розподілом дефектів $N_d(x)$ напівпровідникового матеріалу

в залежності від величини просторово однорідної концентрації точкових дефектів N_{d0} має вигляд [76]:

$$U_{ol}(x) = 0, \quad N_{d0} < N_{dc1}, \quad (3.16)$$

$$U_{ol}(x) = \text{sign} \theta_d \frac{A}{B + \text{sh}(-\sqrt{a}x)}, \quad N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2}, \quad (3.17)$$

$$U_{ol}(x) = \text{sign} \theta_d \frac{A}{B + \text{ch}(\sqrt{a}x)}, \quad N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}, \quad (3.18)$$

$$U_{ol}(x) = \text{sign} \theta_d \frac{A}{B + \sin(\sqrt{|a|x})}, \quad N_{d0} > N_{dc}, \quad (3.19)$$

$$\text{де} \quad A = 3\sqrt{2}a \left(9ca - 2f^2 \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad B = \sqrt{2}f \left(9ca - 2f^2 \right)^{-\frac{1}{2}},$$

$$N_{dc1} = N_{dc} \left(\frac{l_0}{l_d} \right)^2, \quad N_{dc2} = N_{dc} \left(1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} \right), \quad \frac{2\alpha^2}{9\beta} = \frac{4}{9}.$$

Підставивши (3.16) – (3.19) в рівняння Пуассона (3.13), знаходимо електростатичний потенціал при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів N_{d0} :

$$\begin{aligned} \varphi(x) = & -\frac{Sg_s}{2e} e^{g_s x} \int U_l(x, N_{d0}) \cdot e^{-g_s x} dx + \frac{Sg_s}{2e} e^{-g_s x} \int U_l(x, N_{d0}) \cdot e^{g_s x} dx + \\ & + C_1(N_{d0}) e^{g_s x} + C_2(N_{d0}) e^{-g_s x}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

де константи C_1 та C_2 знаходяться з граничних умов $\varphi(x)|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0$.

У наступній ітерації для параметра деформації кристалічної ґратки $U_l(x)$ розв'язок неоднорідного нелінійного диференційного рівняння (3.12) шукався у вигляді $U_l(x) = U_{ol}(x) + U_{ll}(x)$. Враховуючи, що $U_{ol}(x)$ є розв'язком відповідного однорідного рівняння (3.15), $U_{ll}(x)$ знаходився з рівняння

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 U_{ll}}{\partial x^2} - \tilde{a} U_{ll} + f U_{ll}^2 + 2f U_{ol} U_{ll} - c U_{ll}^3 - \\ & - 3c U_{ol}^2 U_{ll} - 3c U_{ol} U_{ll}^2 = p \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2} \left(\frac{e\varphi}{S} - U_{ol} \right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Оскільки параметр деформації $U_{II}(x) \ll 1$, то для оцінки розв'язку $U_{II}(x)$ квадратичними і кубічними членами можна знехтувати. Тоді наближений розв'язок рівняння (3.21) має вигляд

$$U_{II}(x) = \frac{\sqrt{\tilde{a}} S^2 R_s}{2 g_s \rho c_l^2} [e^{-\sqrt{\tilde{a}} x} \int (e^{gx} \int U_{0I}''(x) \cdot e^{-gx} dx - e^{-gx} \int U_{0I}''(x) \cdot e^{gx} dx) e^{\sqrt{\tilde{a}} x} dx - e^{\sqrt{\tilde{a}} x} \int (e^{gx} \int U_{0I}''(x) \cdot e^{-gx} dx - e^{-gx} \int U_{0I}''(x) \cdot e^{gx} dx) e^{-\sqrt{\tilde{a}} x} dx]. \quad (3.22)$$

Складова параметра деформації $U_{II}(x)$ виникає за рахунок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку електронної підсистеми напівпровідника та ансамблю точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій).

3.4. Формування $n-n^+$ переходів у напівпровідниках GaAs з самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами

В цьому параграфі проведені результати розрахунків координатних залежностей електростатичного потенціалу та концентрації електронів провідності для кристалу GaAs при наступних значеннях параметрів: $\alpha^* = 164.6 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2$, $S = -7.17 \text{ eV}$, $\varepsilon = 12$, $\Omega_0 = 180 \text{ \AA}^3$, $K = 0.49 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$, $\rho c_l^2 = 0.72 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$, $l_0 = 5 \text{ \AA}$, $l_d = 29 \text{ \AA}$, $\theta_d = 10 \text{ eV}$, $N_{dc} = 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Константа пружного ангармонізму α обчислювалась за

формулою $\alpha = -\frac{\alpha_p \cdot \rho c_l^2 \cdot (a^{\text{GaAs}})^3}{k_B}$, де $\alpha_p = 5.9 \cdot 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ – температурний

коефіцієнт лінійного розширення, $a^{\text{GaAs}} = 5.65 \text{ \AA}$ – постійна ґратки матеріалу GaAs [146].

При концентрації дефектів $N_{d0} < N_{dc1}$ у напівпровідниковому матеріалі GaAs внутрішнє електричне поле відсутнє, оскільки не відбувається процесу самоорганізації дефектів і не виникає неоднорідна деформація ($U_I(x) = 0$). Це є причиною того, що не

відбувається просторовий перерозподіл електронів провідності ($\Delta n(x) = 0$) і при даних умовах утворення n - n^+ переходу є неможливим.

У діапазоні концентрацій точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій) $N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2}$ в кристалі відбувається їх нелінійна взаємодія, в результаті чого утворюється антисиметричний кластер (формула (3.17)). За рахунок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку відбувається перерозподіл електронної густини і утворюється потрійний електричний шар.

На рис. 3.1 представлена координатна залежність електростатичного потенціалу у напівпровіднику GaAs в околі антисиметричного кластера з точковими дефектами виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) та центру стиску ($\theta_d < 0$) при різних значеннях середньої концентрації електронів провідності.

При зростанні середньої концентрації електронів провідності від $2.6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ до $1.6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ область бар'єрної структури (рис.3.1а) (область потенціальної ями, рис. 3.1б) стає більш різкою і ширина внутрішнього електричного шару зменшується від 120 \AA до 80 \AA (рис.3.2). Причому, якщо $\theta_d < 0$ (вакансії), то утворюється подвійний n - n^+ перехід, а якщо $\theta_d > 0$ – n^+ - n - n^+ перехід. Це пов'язано з тим, що концентрація електронів провідності зростає ($\Delta n(x) > 0$) в тій області кристалу, яка зазнає деформації розтягу, тобто там, де накопичуються міжвузлові атоми ($\theta_d > 0$). І, навпаки, в області, де накопичуються вакансії ($\theta_d < 0$) кристалічна ґратка зазнає деформації стиску і, відповідно, спостерігається недостача електронів $\Delta n(x) < 0$.

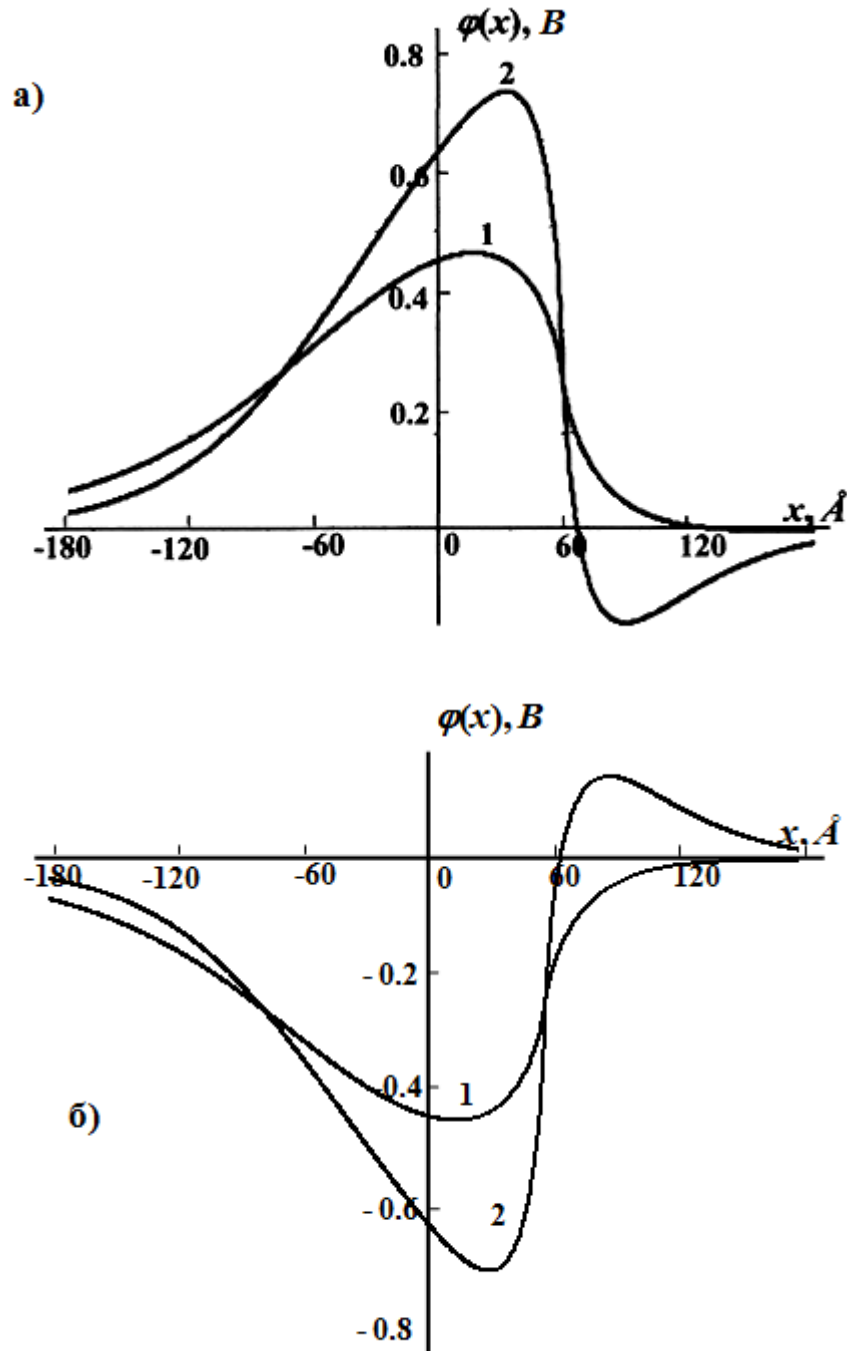


Рис.3.1. Координатна залежність електростатичного потенціалу в околі антисиметричного кластера

при різних середніх значеннях концентрації електронів:

$$1 - n_0 = 2.6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - n_0 = 1.6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3};$$

а) дефекти виду центру стиску ($\theta_d < 0$);

б) дефекти виду центру розтягу ($\theta_d > 0$);

$$(N_{d0} = N_{dc}(1 + (l_0/l_d)^2)/2)$$

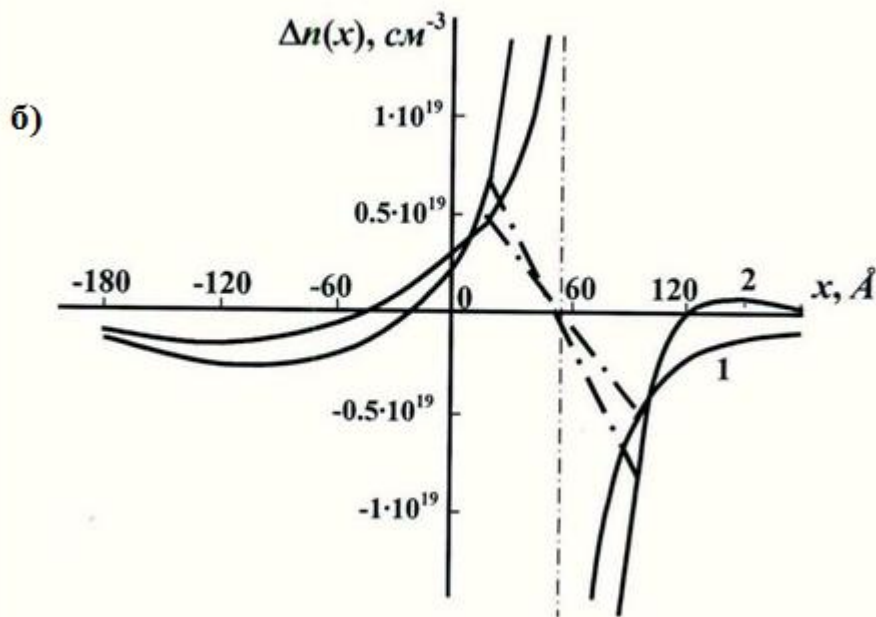
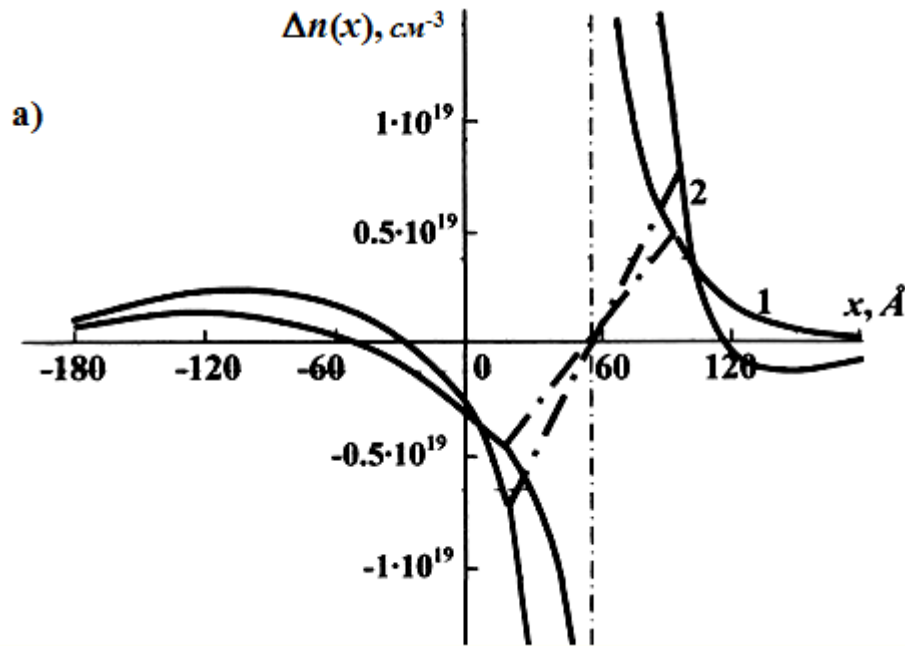


Рис. 3.2. Просторовий перерозподіл електронів провідності в околі антисиметричного кластера при різних значеннях їх середньої концентрації:

$$1 - n_0 = 2.6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3};$$

$$2 - n_0 = 1.6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3};$$

$$\text{а) } \theta_d < 0;$$

$$\text{б) } \theta_d > 0;$$

$$(N_{d0} = N_{dc}(1 + (l_0/l_d)^2) / 2)$$

Штрих-пунктирній лінії $\cdots\cdots\cdots$ на рисунку відповідає $x = \frac{1}{\sqrt{a}} \operatorname{arcsch}(B)$

Розбіжність розв'язку при $x \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\tilde{a}}} \operatorname{arcsch}(B)$ обумовлена нехтуванням вищими похідними в розкладі операторів міжатомної взаємодії [76]. Якщо враховувати вищі похідні в розкладі операторів міжатомної взаємодії, тоді в околі площини $x = \frac{1}{\sqrt{\tilde{a}}} \operatorname{arcsch}(B)$ буде перехідна область (штрихова лінія, рис.3.2) в антисиметричній деформаційній ямі із скінченим значенням перерозподілу вільних електронів $\Delta n(x)$.

Ширина внутрішнього електричного шару пропорційна характеристичній довжині взаємодії атомів напівпровідника з дефектами і залежить від ступеня заповнення \bar{n} електронами зони провідності, концентрації точкових дефектів N_{d0} , пружних сталих матеріалу та константи електрон-деформаційної взаємодії.

При зростанні середньої концентрації дефектів та зменшенні концентрації електронів зростає ширина внутрішнього електричного шару. Це пов'язано із збільшенням ефективного розміру антисиметричного кластера

$$r_{ef} = \frac{1}{\sqrt{\tilde{a}}} = l_d \sqrt{\frac{\frac{N_{d0}}{N_{dc}} - \frac{l_0^2}{l_d^2}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2}}} \quad (3.23)$$

при зростанні середнього числа дефектів N_{d0} та, відповідно, із зменшенням радіуса екранування $\frac{1}{g_s}$ електростатичного потенціалу при зростанні концентрації носіїв струму ($g_s^2 \sim n_0$).

Для діапазону середньої концентрації точкових дефектів $N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc}$, де

$$\tilde{N}_{dc} = N_{dc} \left(1 - \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2}\right) = \frac{\rho c_l^2 k T}{\theta_d^2} \left(1 - \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2}\right) \quad (3.24)$$

картина якісно не змінюється. У цьому випадку виникає симетричний електростатичний потенціал (рис.3.3) і, відповідно, симетричний потрійний електричний шар.

При зростанні концентрації основних носіїв струму від $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ до $3.2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ висота електричного бар'єра (потенціальної ями) зростає на 0.04 В. Ширина області електростатичного бар'єру (потенціальної ями) та його висота (рис.3.3) характеризуються параметром

$$m = \frac{g_s(n)}{\sqrt{\tilde{a}(N_{d0}, n)}}.$$

При зростанні концентрації вільних електронів

(збільшенні параметра m) спостерігається зростання висоти електричного бар'єру (глибини потенціальної ями).

На рис.3.4 представлено перерозподіл електронної густини в околі симетричного кластера при різних середніх значеннях концентрації електронів провідності. Зростання ступеня заповнення зони провідності призводить до зменшення ширини внутрішнього електричного шару подвійного $n-n^+$ переходу.

Локалізація основних носіїв струму у напівпровіднику GaAs із самоорганізованими симетричними нанокластерами, як і у випадку антисиметричного кластера, також відбувається в областях накопичення дефектів виду центру розтягу і, навпаки, в околі вакансійних дефектно-деформаційних структур спостерігається зменшення концентрації електронів відносно їх середнього значення. Це пояснюється тим, що в результаті самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів у матеріалі GaAs з точковими дефектами виду центру розтягу (стиску) відбувається локальне зміщення дна зони провідності, що призводить до виникнення потенціальної ями (потенціального бар'єра) для електронів.

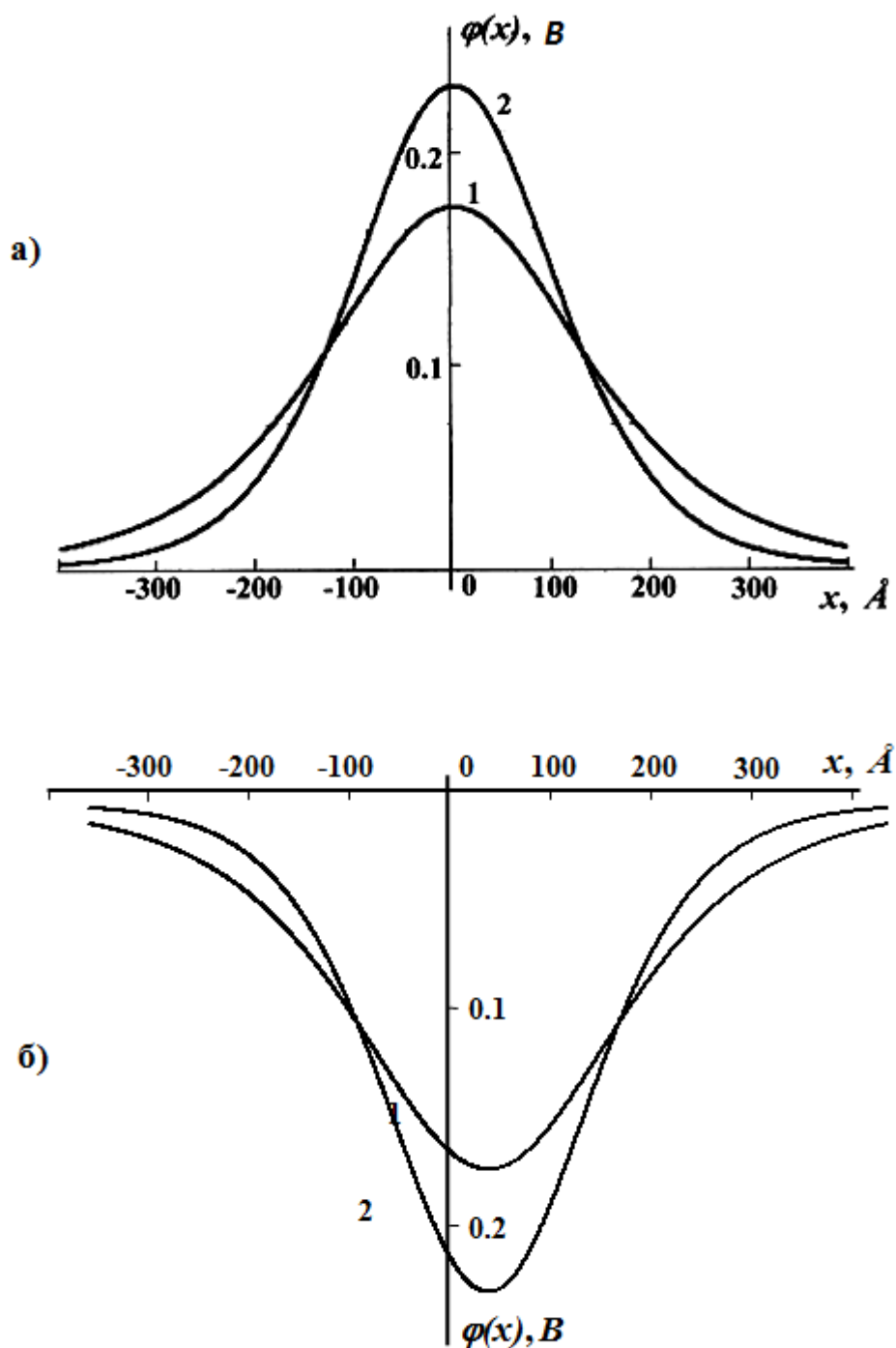


Рис.3.3. Координатна залежність електростатичного потенціалу в околі симетричного кластера при різних середніх значеннях концентрації електронів:
1 – $n_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; **2** – $n_0 = 3.2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$;
а) $\theta_d < 0$; **б)** $\theta_d > 0$;
 $(N_{d0} = N_{dc}(1 - \alpha^2/9\beta))$

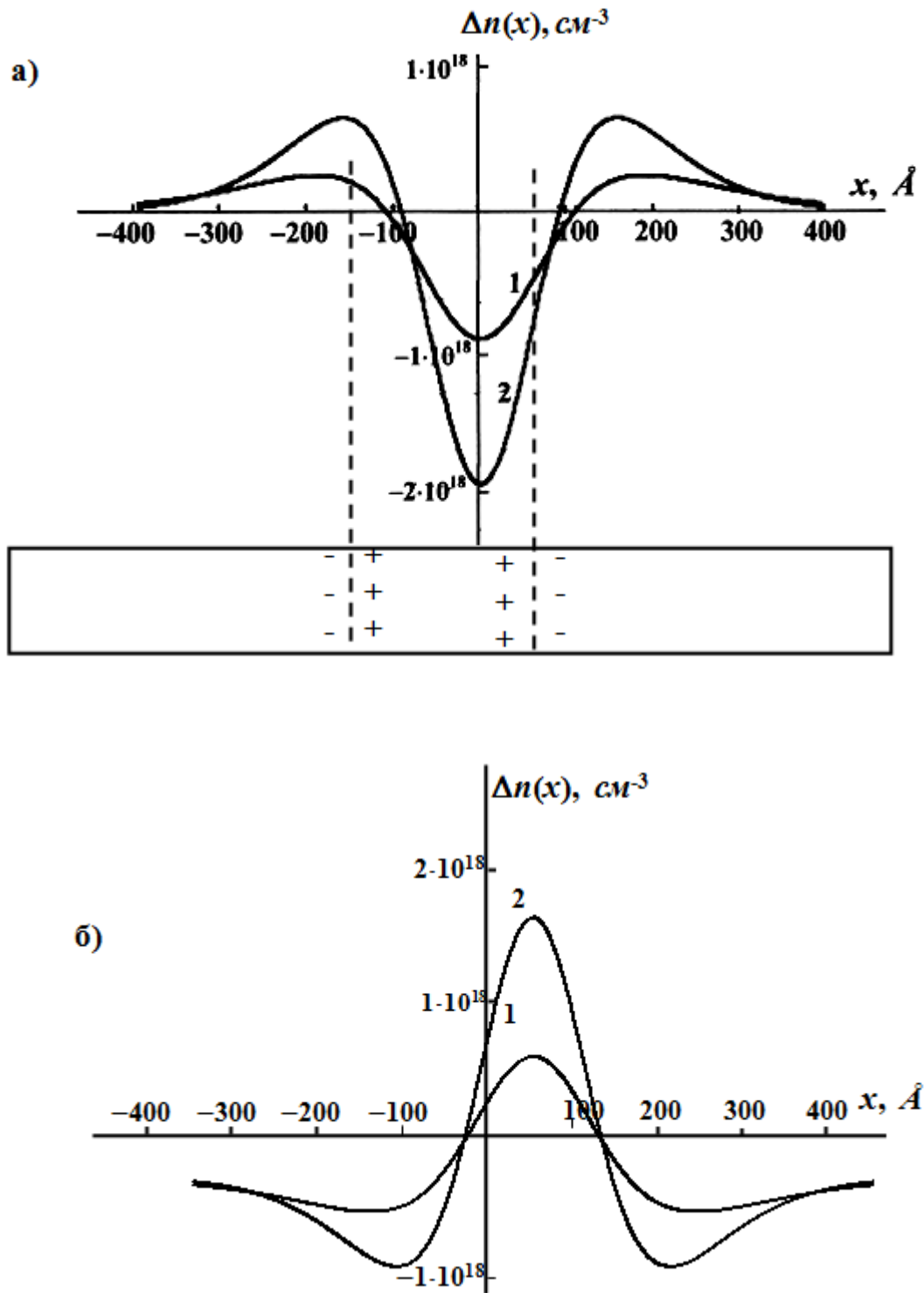


Рис.3.4. Просторовий перерозподіл електронів провідності в околі симетричного кластера при різних значеннях їх середньої концентрації:

$$1 - n_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3};$$

$$2 - n_0 = 3.2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$$

$$\text{а) } \theta_d < 0;$$

$$\text{б) } \theta_d > 0;$$

$$(N_{d0} = N_{dc}(1 - \alpha^2/9\beta))$$

При подальшому зростанні концентрації дефектів $N_{d0} > \tilde{N}_{dc}$ відбувається періодичний перерозподіл електронної густини (рис.3.5) та виникнення періодичного електростатичного потенціалу (рис.3.6). Причиною цього є утворення сильно ангармонічних періодичних дефектно-деформаційних структур, у результаті чого формуються періодичні потенціальні ями розділені потенціальними бар'єрами. Причому, як і в попередніх двох випадках ($N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2}$, $N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc}$), концентрація електронів провідності зростає в тих областях напівпровідникового матеріалу GaAs, де локалізуються міжвузлові атоми. А накопичення вакансій призводить до локального стиску зони провідності, і, відповідно, до утворення потенціального бар'єру для електронів. Таким чином, в кристалі із значною середньою концентрацією точкових дефектів ($N_{d0} > \tilde{N}_{dc}$) виникають послідовно сполучені $n-n^+$ переходи.

Розмір кожного електричного шару та період $n-n^+$ переходів, який дорівнює

$$r = \frac{2\pi}{\sqrt{|\tilde{a}|}} = 2\pi d \sqrt{\frac{\frac{N_{d0}}{N_{dc}} - \frac{l_0^2}{l_d^2}}{\frac{N_{d0}}{N_{dc}} + \frac{S^2 R_s}{\rho c_l^2} - 1}}, \quad (3.25)$$

визначаються концентрацією точкових дефектів, константою деформаційного потенціалу зони провідності, концентрацією електронів та пружними сталими напівпровідникового матеріалу.

При зростанні концентрації електронів провідності періодична електростатична бар'єрна структура має більш різко виражений характер.

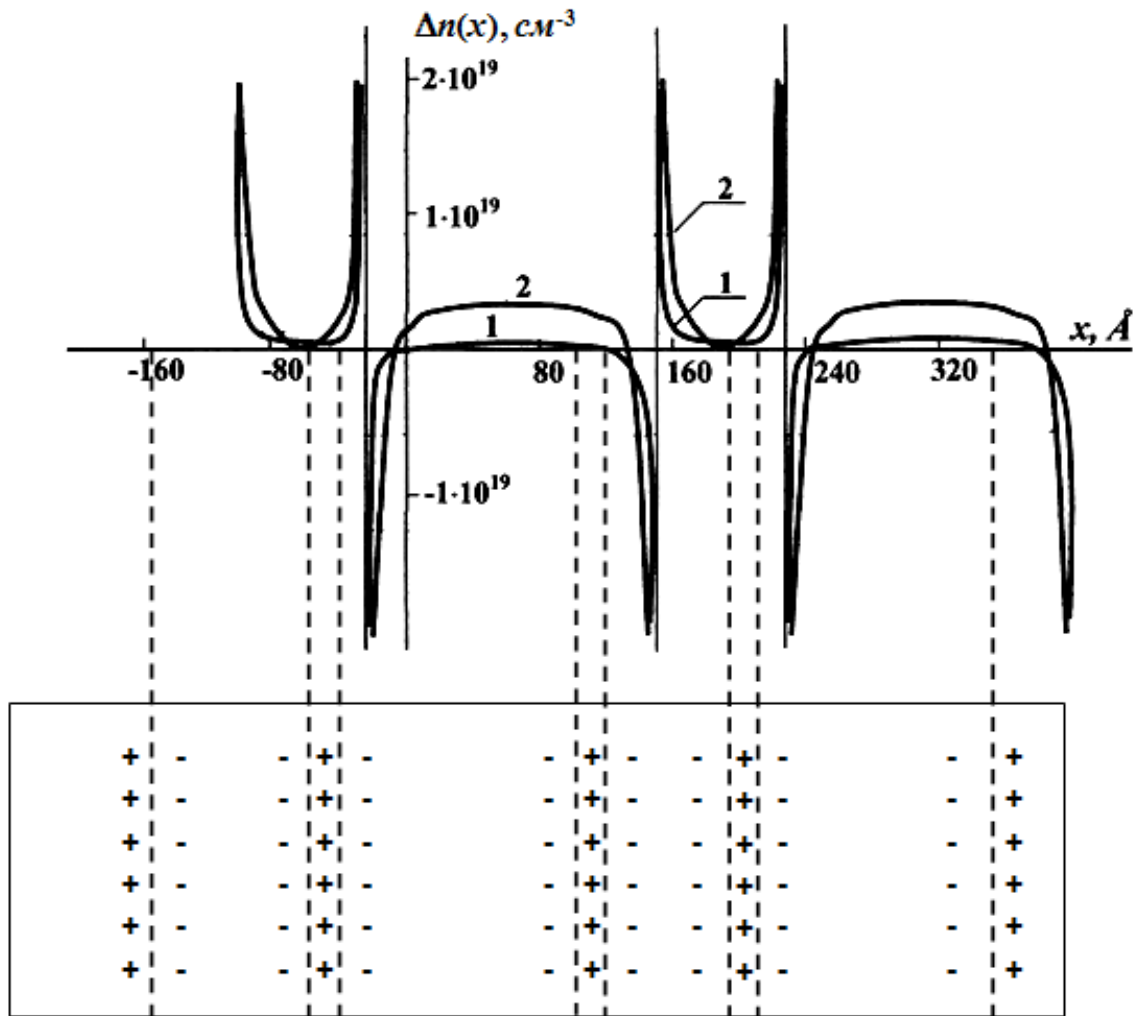


Рис.3.5. Просторовий перерозподіл електронів провідності у напівпровіднику з періодичними дефектно-деформаційними структурами при різних значеннях їх середньої концентрації:

$$\mathbf{1} - n_0 = 2.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}; \quad \mathbf{2} - n_0 = 1.0 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$$

$$(N_{d0} = 2N_{dc})$$

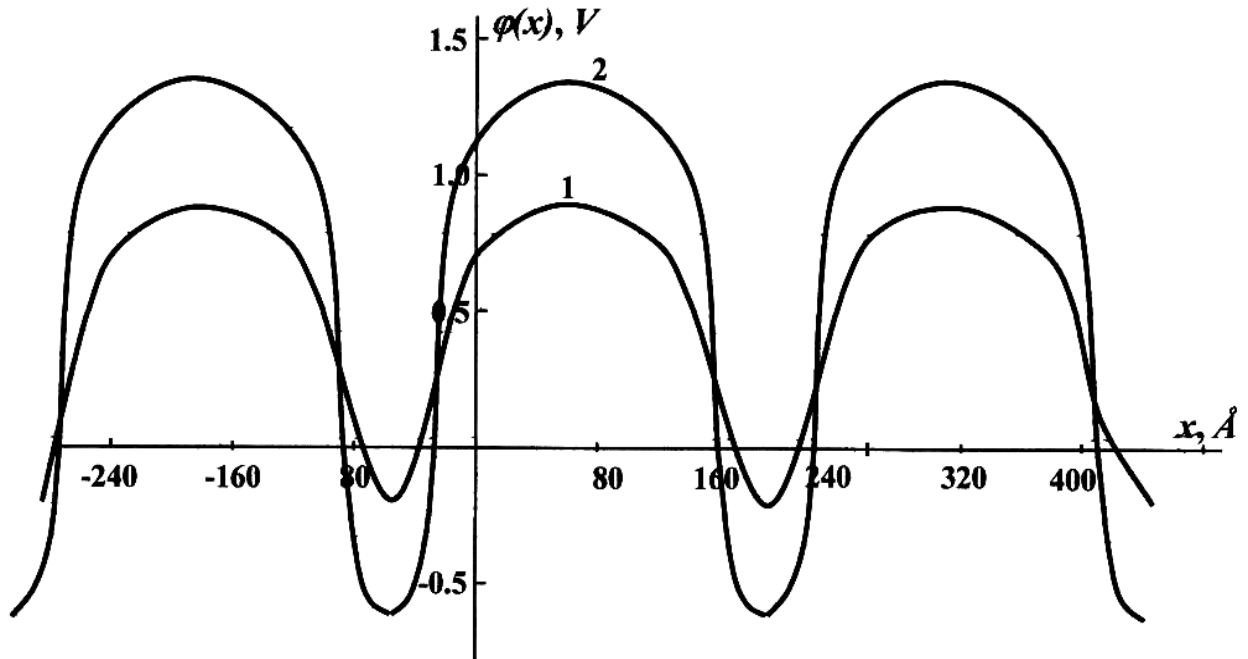


Рис.3.6. Координатна залежність електростатичного потенціалу у напівпровіднику з періодичними дефектно-деформаційними структурами при різних середніх значеннях концентрації електронів:

$$\begin{aligned} \mathbf{1} - n_0 = 2.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}; & \quad \mathbf{2} - n_0 = 1.0 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3} \\ (N_{d0} = 2N_{dc}) \end{aligned}$$

Зростання концентрації точкових дефектів та ступеня заповнення \bar{n} електронами зони провідності (збільшення параметра m) є причиною зменшення періоду $n-n^+$ структури.

Крім цього, збільшення концентрації електронів провідності у напівпровідниковому матеріалі призводить до зменшення критичної концентрації дефектів \tilde{N}_{dc} (формула (3.24)), при якій формуються періодичні дефектно-деформаційні структури, і, відповідно, виникають послідовно сполучені періодичні $n-n^+$ переходи.

3.5. Електрон-деформаційна складова параметра деформації в кристалі з самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами

В околі дефектно-деформаційних структур виникає неоднорідна деформація, яка в результаті самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до локального перерозподілу електронної густини. Така зміна концентрації електронів є причиною виникнення додаткової деформації кристалічної ґратки, яка визначається співвідношенням (3.22).

Повна деформація напівпровідникового матеріалу з точковими дефектами визначається співвідношенням

$$\begin{aligned}
 U(x) = & U_0 + U_{0l}(x) + U_{1l}(x) = \frac{\theta_d}{K} N_{d0} + \\
 & + \frac{\sqrt{a} S^2 R_s}{2 g_s \rho_c^2} [e^{-\sqrt{a}x} \int (e^{gx} \int U_{0l}''(x) \cdot e^{-gx} dx - e^{-gx} \int U_{0l}''(x) \cdot e^{gx} dx) e^{\sqrt{a}x} dx - \\
 & - e^{\sqrt{a}x} \int (e^{gx} \int U_{0l}''(x) \cdot e^{-gx} dx - e^{-gx} \int U_{0l}''(x) \cdot e^{gx} dx) e^{-\sqrt{a}x} dx] + \\
 & + \begin{cases} 0, & N_{d0} < N_{dc1} \\ \text{sign } \theta_d \frac{A}{B + \text{sh}(-\sqrt{a}x)}, & N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2} \\ \text{sign } \theta_d \frac{A}{B + \text{ch}(\sqrt{a}x)}, & N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc} \\ \text{sign } \theta_d \frac{A}{B + \sin(\sqrt{|a|x})}, & N_{d0} > \tilde{N}_{dc} \end{cases} \quad (3.26)
 \end{aligned}$$

На рис.3.7 представлено результати розрахунку координатної залежності електрон-деформаційної складової параметра деформації $U_{1l}(x)$ напівпровідникового матеріалу GaAs в околі симетричного кластера з точковими дефектами виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) із середньою концентрацією в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc}$ при різних середніх значеннях концентрації електронів провідності.

Характер координатної залежності електрон-деформаційної складової параметра деформації напівпровідникового матеріалу визначається просторовим перерозподілом електронів провідності (рис.3.4б). Оскільки константа деформаційного потенціалу зони провідності $S < 0$, то в околі площин $x = \pm 120 \text{ \AA}$, де зменшення концентрації носіїв струму $\Delta n(x)$ є максимальним, спостерігається найбільший додатковий стиск напівпровідникового GaAs за рахунок самоузгодженої взаємодії електронної підсистеми із пружно деформованим середовищем.

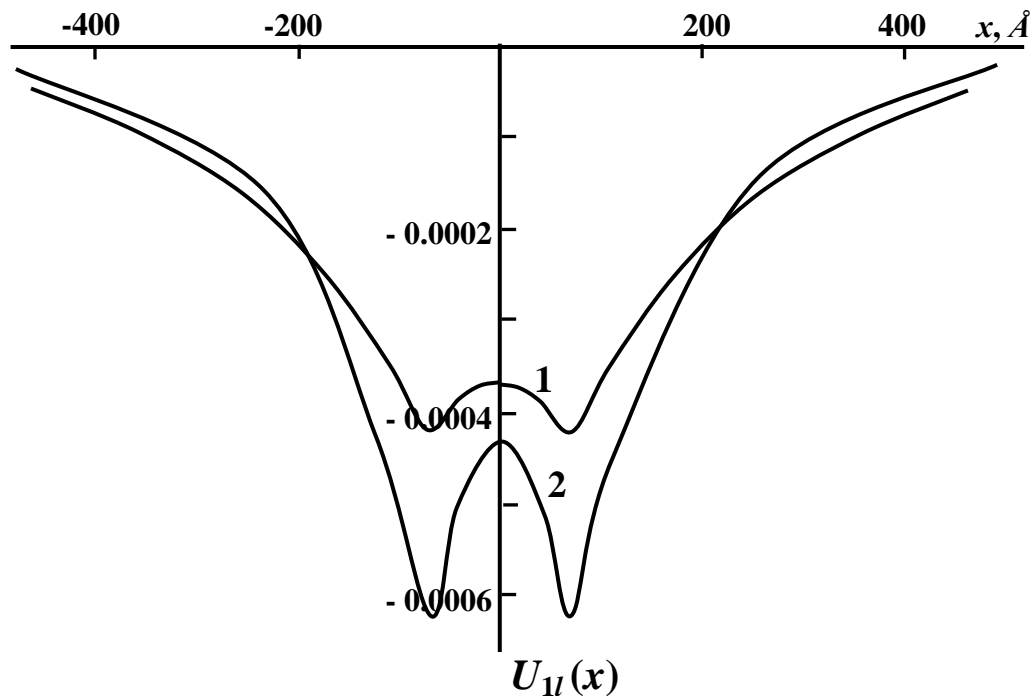


Рис.3.7. Просторовий розподіл електронної складової параметра деформації в околі симетричного кластера при різних середніх значеннях концентрації електронів провідності:

$$\mathbf{1} - n_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}; \quad \mathbf{2} - n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$$

$$(N_{d0} = N_{dc}(1 - \alpha^2/9\beta), \quad \theta_d > 0)$$

При зростанні середньої концентрації вільних електронів спостерігається збільшення деформації стиску за рахунок електрон-деформаційної взаємодії, що призводить в цілому до зменшення величини деформації розтягу матеріалу напівпровідника, спричиненої наявністю точкових дефектів виду центру розтягу із середньою концентрацією в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc}$.

В результаті самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку електронної підсистеми напівпровідника з точковими дефектами ($\theta_d > 0$) відбувається зменшення параметра деформації матеріалу $U(x)$ ($U_{II}(x) < 0$). Зокрема, при середній концентрації електронів провідності $n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ в матеріалі GaAs зменшення просторово усередненого значення параметра деформації ($\bar{U}_{II} = \frac{1}{L} \int_L U_{II}(x) dx$) становить $4 \cdot 10^{-4}$.

При обчисленні просторово усереднених значень електрон-деформаційної складової параметра було враховано, що концентрація кластерів становить $\sim 8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ [47].

Дані теоретичні розрахунки добре узгоджуються з результатами експериментальних досліджень концентрації антиструктурних дефектів As_{Ga} , які є центрами розтягу ($\theta_d > 0$), та відносної зміни параметра кристалічної ґратки матеріалу GaAs легованого і нелегованого кремнієм [3]. Ці експериментальні дослідження показали, що введення домішок кремнію (збільшення концентрації електронів) призводить до зменшення відносної зміни параметра ґратки матеріалу GaAs на $(2 \div 5) \cdot 10^{-4}$ в залежності від співвідношення потоків миш'яку та галію. Спроба пояснити такий ефект за рахунок заміщення атомів галію атомами кремнію дає занижений результат [3], який на порядок менший

від експериментальних даних ($U = \frac{N_{d0}}{N_0} \left(\frac{r_{\text{Si}}^3}{r_{\text{Ga}}^3} - 1 \right) = 1.7 \cdot 10^{-5}$ [147], r_{Si} , r_{Ga} –

іонні радіуси кремнію та галію, відповідно, N_0 – концентрація атомів матеріалу GaAs).

Підставивши вираз для деформації (3.26) в (2.13), отримаємо просторовий перерозподіл точкових дефектів $N_d(x)$ при різних значеннях їх середньої концентрації з врахуванням взаємодії електронної підсистеми з пружним середовищем кристалу, що містить дефектно-деформаційні структури (симетричний кластер).

Як бачимо з рис.3.8, в результаті самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку введення донорних домішок (зростання середньої концентрації вільних електронів) призводить до зменшення концентрації самоорганізованих власних точкових дефектів кристалічної ґратки в межах симетричного кластера та збільшення – за його межами. Збільшення концентрації носіїв струму в напівпровідниковому матеріалі GaAs призводить до збільшення розміру симетричного кластера (рис.3.8, формула (3.23)).

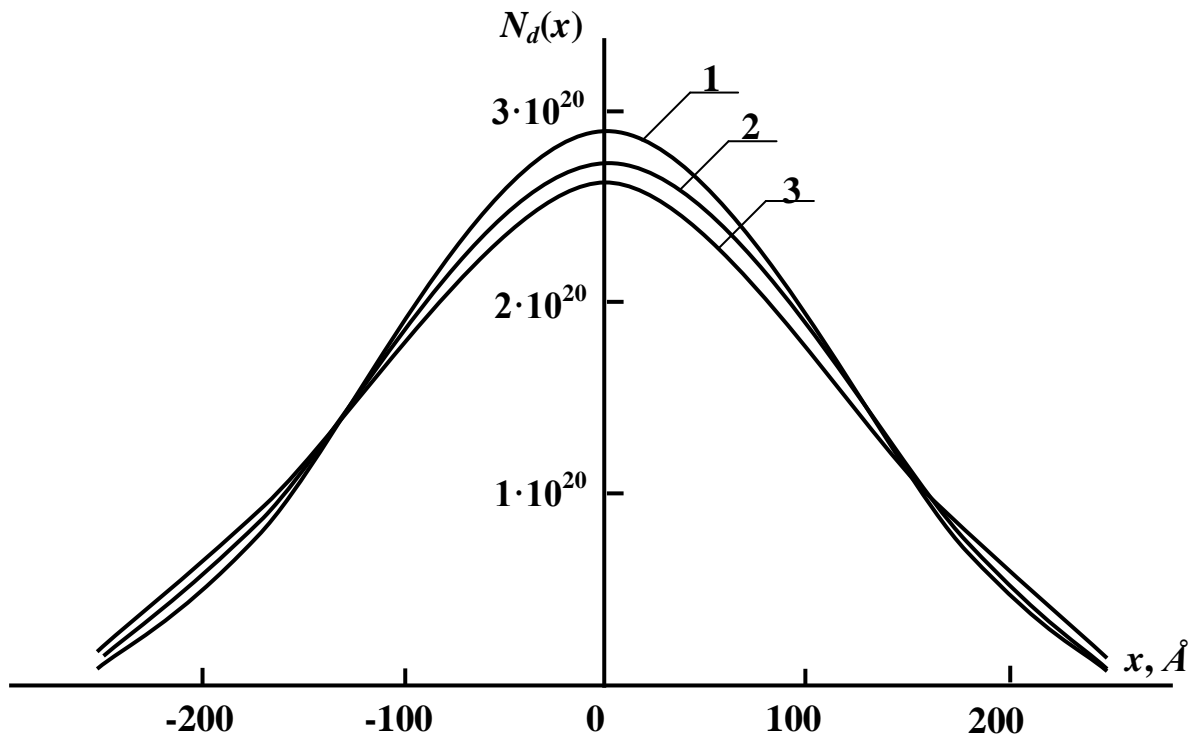


Рис.3.8. Просторовий перерозподіл точкових дефектів ($\theta_d > 0$) при різних середніх значеннях концентрації електронів провідності:

$$1 - n_0 = 10^{12} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - n_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}; \quad 3 - n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$$

Зокрема, при середній концентрації вільних електронів $n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ значення концентрації точкових дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$, $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$) в центрі симетричного кластера зменшується на $\sim 8\%$ у порівнянні із нелегованим напівпровідниковим матеріалом GaAs (рис.3.8, крива 1).

Легування донорними домішками (збільшення середньої концентрації вільних електронів) матеріалу GaAs, який містить точкові дефекти виду центру стиску ($\theta_d < 0$) з середньою концентрацією в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc}$ (симетричний кластер), в результаті самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії призводить до зменшення за абсолютною величиною ($U_{II}(x) > 0$) деформації стиску, що існує за рахунок наявності вакансій.

Самоузгоджена взаємодія електронної підсистеми з ансамблем точкових дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$) призводить до зміни просторового розподілу останніх у легovanому донорними домішками напівпровідниковому матеріалі GaAs у порівнянні з нелегованим напівпровідником. А саме, в центрі симетричного кластера концентрація вакансій зменшується, а за його межами – зростає. Це призводить до збільшення розміру симетричного кластера.

Тобто легування донорними домішками (збільшення концентрації електронів провідності) напівпровідникового матеріалу GaAs, як і у випадку наявності точкових дефектів – центрів розтягу, так і дефектів виду центру стиску, призводить до зменшення концентрації власних дефектів в межах симетричного кластера ($N_{dc2} < N_{d0} < \tilde{N}_{dc}$) та зменшення абсолютної величини параметра деформації кристалічної ґратки в результаті самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії.

3.6. Роль електрон-деформаційної взаємодії у формуванні $n-n^+$ переходів у імплантованій кристалічній матриці

У результаті імплантації домішок в кристалічну матрицю в останній виникає неоднорідна деформація $U(x)$, яка, в свою чергу, призводить до локальної зміни зонного спектру. У результаті цього відбувається просторовий перерозподіл електронів провідності $\Delta n(x)$ і, відповідно, виникає електростатичний потенціал $\varphi(x)$.

Розглянемо випадок, коли концентрація імплантованих домішок не перевищує значення $N_{dcl} = 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. У цьому випадку не відбувається процесів самоорганізації і можна знехтувати нелінійною взаємодією домішок та їх взаємодією з пружним середовищем кристалічної матриці. Тоді гамільтоніан (3.1) такої системи можна представити у вигляді

$$\hat{H} = \sum_{i\sigma} S U(x) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{ij} ' \sum_{\sigma} \lambda_{ij}^0 c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i K \Omega_0 U^2(x) + \hat{H}_{кул}. \quad (3.27)$$

Для знаходження електронної густини $\Delta n(x)$ і електростатичного потенціалу $\varphi(x)$ в напрямку імплантації (вздовж осі ОХ) необхідно самоузгоджено розв'язати систему рівнянь (3.2), (3.6)-(3.9) та стаціонарне рівняння дифузії для імплантованої домішки

$$D \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{N_0}{N_b} N(x) \frac{\partial U(x)}{\partial x} \right] \theta(N_r - N(x)) + v \frac{\partial N(x)}{\partial x} = 0, \quad (3.28)$$

де D – коефіцієнт дифузії; $N(x)$, N_0 – концентрація імплантованих домішок та атомів кристалічної матриці, відповідно; N_b – стала величина, яка визначається формулою (2.23); $\theta(N_r - N(x))$ – функція Хевісайда, яка вказує на те, що даний доданок відмінний від нуля в області пружних деформацій ($N < N_r$); N_r – концентрація домішок в площині $x = x_0$, що відповідає границі пружності; v – швидкість зсуву поверхні кристалу внаслідок розпилення імплантованими домішками.

В рівнянні дифузії перший доданок описує звичайну градієнтну дифузію, а другий доданок характеризує якісно нове явище – “потік

деформаційного втягування”, який в нашому випадку створюється не тільки механічною [48, 51], але і електронною складовою деформації.

В задачі розглядається випадок імплантованої кристалічної матриці із значною середньою концентрацією електронів провідності ($n_0 \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Цей випадок може бути реалізований при імплантації кристалічної матриці GaAs домішками кремнію [148] (аргону [149]). Тоді перерозподіл електронів провідності, зумовлений деформацією імплантованої кристалічної матриці, може призвести практично до повної компенсації деформаційного зсуву зони провідності енергією електростатичної взаємодії ($e|\phi| \sim SU$). В цьому випадку добрим наближеним розв’язком рівняння Шредінгера (3.6) є хвильова функція у вигляді плоскої хвилі. Ця умова може бути реалізована при великих початкових (в недеформованому стані) концентраціях електронів провідності, характерних для напівпровідників з великим ступенем легування. Перерозподіл вільних електронів у результаті зсуву і локальної зміни ширини зони провідності при виникненні неоднорідної деформації за рахунок наявності домішок ненульового об’єму призводить до значного накопичення заряду і енергія електростатичної взаємодії стає того ж порядку, що і деформаційна енергія SU [121-123].

В лінійному наближенні зміна концентрації електронів провідності $\Delta n(x) = n(x) - n_0$ визначається співвідношенням (3.10).

Повна деформація кристалічної ґратки імплантованої матриці визначається сумою двох складових

$$U(x) = U_M(x) + \Delta U_{el-def}(x). \quad (3.29)$$

Механічна складова деформації $U_M(x)$, яка виникає в результаті наявності ненульового об’єму імплантованої домішки, визначається

$$U_M(x) = k_{v_i} \frac{N(x)}{N_0}, \quad (3.30)$$

де $k_{v_i} = \frac{V_i}{V_0}$; V_i , V_0 – відповідно, об’єм легованої домішки і атомів кристалічної матриці. Електронна складова параметра деформації

кристалічної ґратки імплантованої домішки $\Delta U_{el-def}(x)$ виникає за рахунок просторового перерозподілу електронної густини і визначається співвідношенням

$$\Delta U_{el-def}(x) = -\frac{S \cdot \Delta n(x)}{K}. \quad (3.31)$$

Для знаходження розв'язку системи рівнянь (3.8), (3.10) та (3.28) скористаємось методом послідовних наближень. В першому наближенні знаходиться розподіл імплантованих домішок з диференціального рівняння (3.28) з граничними умовами $N(\infty)=0$ та $N(x_0) = N_r$ без врахування „потoku деформаційного втягування”:

$$N(x) = N_r e^{-\frac{\nu}{D}(x-x_0)}, \quad x \geq x_0 \quad (3.32)$$

З врахуванням (3.10), (3.29) та (3.32) рівняння Пуассона (3.8) запишеться у вигляді:

$$\nabla^2 \varphi(x) - g_s^2 \varphi(x) = -g_s^2 \frac{k_{vi} S \varepsilon_r}{e} e^{-\frac{\nu}{D}(x-x_0)} \quad (3.33)$$

з граничними умовами

$$\begin{cases} \varphi(x)|_{x \rightarrow \infty} = 0, \\ \varphi(x_0) = \varphi_0 = \frac{k_{vi} S \varepsilon_r}{e} \cdot \frac{1}{1 + \frac{\nu}{D g_s}}, \end{cases} \quad (3.34)$$

де $\varepsilon_r = \frac{N_r}{N_0}$ – параметр деформації імплантованої кристалічної матриці на границі пружності ($x = x_0$).

Друга гранична умова $\varphi(x_0)$ вибрана так, щоб в області $x \in [x_0; +\infty)$ виконувалась умова електронейтральності кристалічної матриці з імплантованими домішками:

$$\int_L \Delta n(x) dx = 0. \quad (3.35)$$

В результаті розв'язку рівняння (3.33) отримується координатна залежність потенціалу електростатичного поля в пружно-деформованій області імплантованої матриці:

$$\varphi(x) = \frac{k_{v_i} S \varepsilon_r}{e \cdot \left(\left(\frac{v}{Dg_s} \right)^2 - 1 \right)} \cdot \left(\frac{v}{Dg_s} \cdot \exp(-g_s(x - x_0)) - \exp\left(-\frac{v}{D}(x - x_0)\right) \right). \quad (3.36)$$

Вираз для потенціалу електростатичного поля, створеного за рахунок просторового перерозподілу вільних електронів в імплантованій кристалічній матриці, складається з двох доданків. Перший доданок відповідає складовій потенціалу, зумовленій взаємодією електронної підсистеми та пружного середовища кристалічної матриці з імплантованими домішками. Друга складова електростатичного потенціалу виникає за рахунок просторового перерозподілу електронів провідності внаслідок дії двох протилежних за напрямом ефектів: дифузії створеної механіко-деформаційними ефектами та звичайної градієнтної дифузії.

Підставивши (3.36) в (3.10) з врахуванням (3.30), (3.31) та (3.32), отримаємо вираз для просторового перерозподілу електронів провідності та електрон-деформаційної складової параметра деформації кристалічної матриці з імплантованими домішками:

$$\Delta n(x) = \frac{R_s k_{v_i} S \varepsilon_r \cdot \frac{v}{Dg_s}}{\left(\frac{v}{Dg_s} \right)^2 - 1} \cdot \left(\exp(-g_s(x - x_0)) - \frac{v}{Dg_s} \exp\left(-\frac{v}{D}(x - x_0)\right) \right), \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \Delta U_{\text{el-def}}(x) = & - \frac{S^2 R_s k_{v_i} \varepsilon_r \cdot \frac{v}{Dg_s}}{K \left(\left(\frac{v}{Dg_s} \right)^2 - 1 \right)} \cdot \left(\exp(-g_s(x - x_0)) - \right. \\ & \left. - \frac{v}{Dg_s} \exp\left(-\frac{v}{D}(x - x_0)\right) \right). \end{aligned} \quad (3.38)$$

У наступній ітерації рівняння Пуассона (3.8) та рівняння для дифузії імпантованих домішок (3.28) розв'язувалось з врахуванням отриманих значень параметра деформації та просторового перерозподілу електронів провідності.

Результати числових розрахунків координатної залежності електростатичного потенціалу $\varphi(x)$, обумовленого просторовим перерозподілом електронів провідності в результаті локальної зміни ширини зони провідності при неоднорідній деформації кристалічної ґратки матриці GaAs(100) імпантованої домішками Si (Ar) з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії, приведені при наступних значеннях параметрів: $\varepsilon_r = 0.08$; $D = 6 \text{ Å}^2/\text{с}$; $\nu = 1 \text{ Å}/\text{с}$ і представлені на рис.3.9.

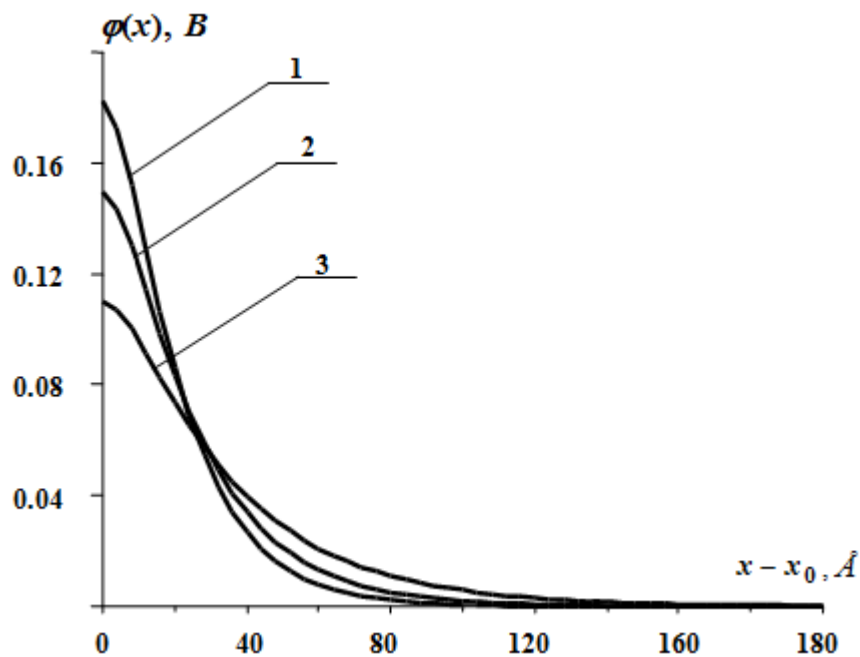


Рис.3.9. Координатна залежність електростатичного потенціалу $\varphi(x)$

при різних значеннях середньої концентрації електронів n_0 :

$$1 - n_0 = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - n_0 = 10^{20} \text{ см}^{-3}; \quad 3 - n_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$$

Як бачимо, при віддаленні від границі пружності ($x = x_0$) електростатичний потенціал при різних значеннях середньої концентрації вільних електронів монотонно зменшується.

Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності в діапазоні $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} \leq n_0 \leq 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ потенціал електростатичного поля біля границі пружності ($x \geq x_0 + 0$) зростає, а на відстані $x \geq x_c(n_0)$ характер цієї залежності змінюється на протилежний. Тут $x_c(n_0)$ – площина, в якій зміна концентрації електронів $\Delta n = 0$ (рис.3.10), тобто границя n - n^+ переходу.

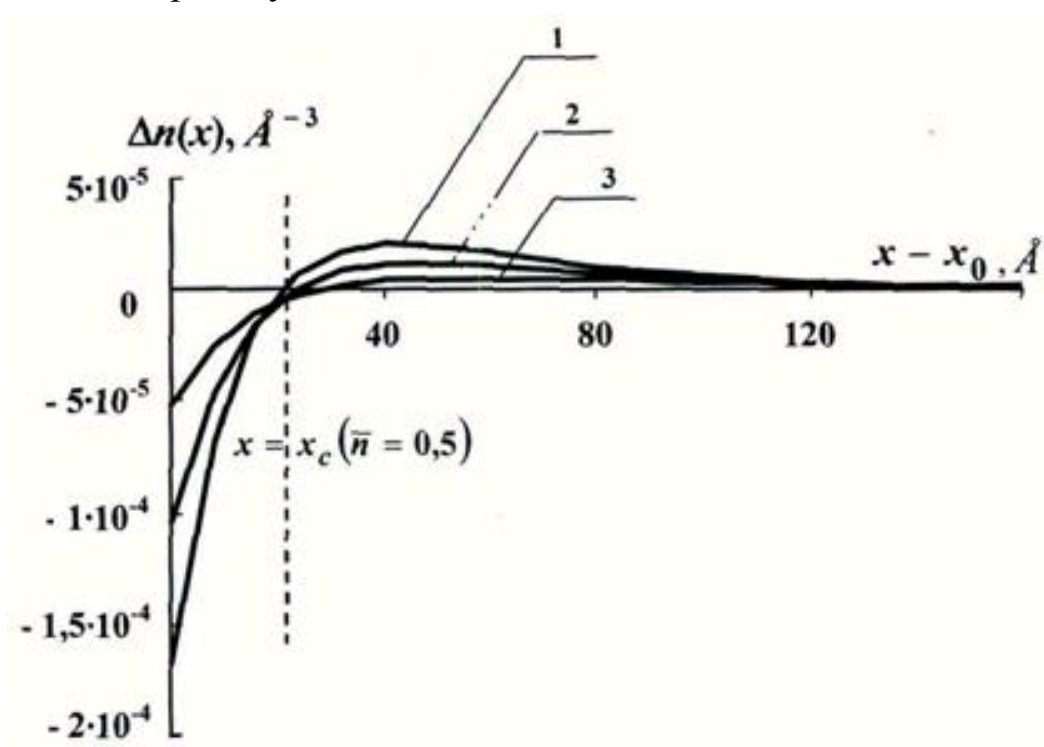


Рис.3.10. Координатна залежність просторового перерозподілу електронів $\Delta n(x)$ при різних значеннях їх середньої концентрації n_0 :
1 – $n_0 = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$; **2** – $n_0 = 10^{20} \text{ см}^{-3}$; **3** – $n_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$;
 штрихова лінія відповідає границі $x = x_c(\bar{n})$ n - n^+ переходу

Така поведінка електростатичного потенціалу з ростом концентрації вільних електронів n_0 пов'язана з тим, що поблизу границі пружності ($x \geq x_0$) енергетична ширина зони провідності стає більшою у порівнянні з шириною зони провідності в області $x > x_c(n_0)$ за рахунок протилежного характеру електрон-деформаційної складової параметра деформації кристалічної ґратки матриці з імплантованими домішками $\left(\Delta U_{el-def} = -\frac{S \cdot \Delta n(x)}{K} \right)$ в цих областях (рис.3.11).

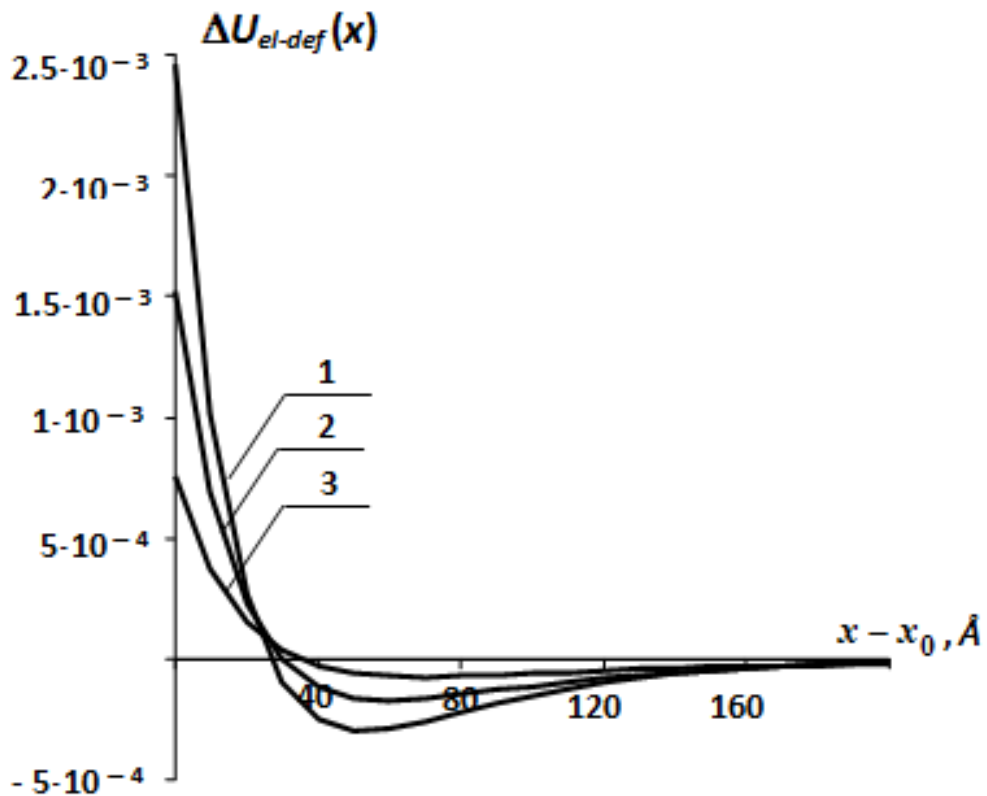


Рис.3.11. Координатна залежність електронної складової деформації

при різних значеннях середньої концентрації електронів n_0 :

$$1 - n_0 = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - n_0 = 10^{20} \text{ см}^{-3}; \quad 3 - n_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$$

Аналіз координатної залежності зміни концентрації електронів $\Delta n(x)$ показує (рис.3.10), що в околі $x_0 < x \leq x_c$ має місце недостача носіїв струму, а в області $x > x_c$ – їх надлишок. Такий характер поведінки самоузгодженого просторового перерозподілу електронів провідності в пружно-деформованому напівпровідниковому матеріалі можна пояснити дією двох конкуруючих факторів: 1) наявністю неоднорідної деформації кристалічної ґратки матриці, створеної просторовим розподілом імплантованих домішок кремнію; 2) впливом електрон-деформаційної взаємодії на величину параметра деформації кристалічної ґратки імплантованої матриці.

Таким чином, легування кристалічної матриці GaAs домішками Si призводить до утворення подвійного електричного шару в пружно-деформованій області $(x_c - d^-(n_0) < x < x_c + d^+(n_0))$, де $d^-(n_0)$, $d^+(n_0)$ – відповідно, ефективна ширина області з недостачею і надлишком електронів).

З ростом концентрації електронів провідності в діапазоні $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} \leq n_0 \leq 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ область бар'єрної структури ($n-n^+$) стає більш різкою, а ширина області $d^-(n_0)$ з недостачею електронів – меншою (рис.3.10).

З рис.3.11 бачимо, що в пружно деформованій області ($x_0 < x \leq x_c$) електронна складова деформації $(\Delta U_{el-def} = -\frac{S \cdot \Delta n(x)}{K})$ додатково розтягує імплантовану кристалічну матрицю, а в області $x > x_c$ – стискає, що протидіє механічній деформації розтягу, зумовленої ненульовим об'ємом імплантованих домішок. Зокрема, в області поблизу границі пружності додатковий розтяг імплантованої кристалічної матриці за рахунок електрон-деформаційної взаємодії становить 9% ($n_0 = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) відносно механічної деформації, що виникає за рахунок ненульового об'єму імплантованих домішок.

На рис.3.12 представлена координатна залежність параметра всебічної деформації (створеної як за рахунок наявності ненульового

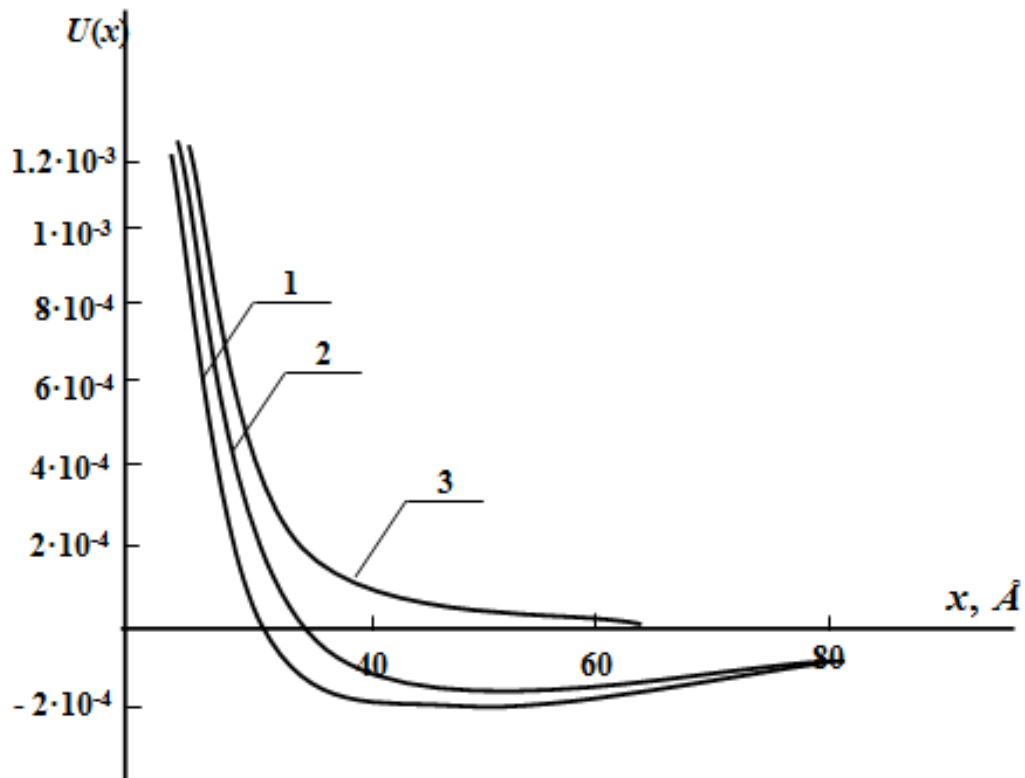


Рис.3.12. Координатна залежність параметра деформації
імплантованої кристалічної матриці GaAs
при різних значеннях середньої концентрації електронів n_0 :

- 1 – $n_0 = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 2 – $n_0 = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$;
3 – без врахування електрон-деформаційних ефектів

об'єму домішок, так і взаємодією електронної підсистеми з пружним полем деформації) імплантованої кристалічної матриці в області $x > x_c$ при різних середніх значеннях концентрації електронів провідності.

В області $x > 30 \text{ Å}$ в сильно легованих напівпровідниках ($n_0 > 10^{19} \text{ см}^{-3}$) знак параметра деформації за рахунок електрон-деформаційної взаємодії змінюється на протилежний. Це пояснюється тим, що в напівпровідниковому матеріалі із значною концентрацією носіїв струму в області $x > 35 \text{ Å}$ величина електрон-деформаційної складової параметра деформації, яка призводить до стиску кристалічної

гратки, перевищує величину механічної деформації розтягу, яка існує за рахунок ненульового об'єму імплантованих домішок.

Слід зазначити, що в результаті самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку зміниться концентраційний профіль імплантованих домішок в напруженій кристалічній матриці. Це пов'язано з тим, що як і механічне [48, 50], так і електрон-деформаційне напруження буде впливати на процес дифузії домішок.

3.7. Висновки до розділу 3

1. Побудовано теорію утворення $n-n^+$ переходів у широкозонних напівпровідникових кристалах (GaAs, CdTe) з самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами і встановлено критерії їх виникнення у напівпровіднику GaAs. Показано, що при $N_{d0} < N_{dc1} = 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ у кристалі не виникає $n-n^+$ переходів. У діапазоні концентрацій дефектів $N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc}$ виникають подвійні $n-n^+$ переходи. При $N_{d0} > N_{dc} = 10^{20} \text{ см}^{-3}$ у напівпровіднику виникають послідовно сполучені періодичні $n-n^+$ переходи.

2. Встановлено, що електрони локалізуються в області накопичення міжвузлових атомів (дефектів виду центру розтягу) і, навпаки, їх концентрація зменшується в областях накопичення вакансій (дефектів виду центру стиску), що пояснюється зміною потенціального профілю електронів під дією деформації.

3. Показано, що з ростом середньої концентрації дефектів N_{d0} ширина внутрішнього електричного шару подвійного $n-n^+-n$ переходу збільшується (період послідовно сполучених $n-n^+$ переходів зменшується), а з ростом константи деформаційного потенціалу та концентрації електронів провідності як ширина внутрішнього електричного шару подвійного $n-n^+-n$ переходу, так і період послідовно сполучених $n-n^+$ переходів зменшується. Це пояснюється збільшенням

ефективного розміру кластера (зменшенням періоду дефектно-деформаційної структури) при зростанні середнього числа дефектів N_{d0} та зменшенням радіуса електрон-деформаційного екранування $\frac{1}{g_s}$ електростатичного потенціалу при зростанні концентрації електронів провідності n_0 .

4. Встановлено, що в результаті самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії зростання концентрації електронів провідності у напівпровіднику GaAs із самоорганізованими точковими дефектами (симетричний кластер) призводить до того, що концентрація дефектів виду центру розтягу в межах кластера зменшується і, навпаки, за його межами – зростає.

5. Встановлено, що в результаті самоузгодженої взаємодії електронної підсистеми та пружно-деформованої кристалічної матриці GaAs, імпантованої домішками кремнію, в останній виникає $n-n^+$ перехід.

6. Показано, що з ростом концентрації електронів провідності в кристалічній матриці GaAs поблизу границі пружності ($x \geq x_0$) величина потенціалу електростатичного поля зростає, а за площиною $x = x_c$, яка відповідає границі $n-n^+$ переходу – зменшується.

7. Показано, що біля границі пружності ($x \geq x_0$) імпантованого домішками матеріалу електрон-деформаційна взаємодія додатково розтягує кристалічну матрицю на 9% ($n_0 = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$), а за площиною $x = x_c$, яка відповідає границі $n-n^+$ переходу – стискає, що пояснюється локальною зміною концентрації електронів.

РОЗДІЛ 4. Самоорганізований дифузійно-деформаційний розподіл точкових дефектів та електронів у напружених гетеросистемах

4.1. Вступ

У другому розділі роботи приведені результати теоретичного дослідження просторового перерозподілу точкових дефектів і домішок та параметра деформації в напруженому епітаксійному шарі та у тришаровій напруженій гетероструктурі із незначною концентрацією дефектів ($N_{d0} \ll N_{dc}$). Однак, останнім часом широке використання у мікроелектронних приладах знайшли гетероструктури GaAs/InAs/GaAs, ZnTe/CdTe/ZnTe з напруженими квантовими ямами, які працюють в умовах інтенсивного опромінення швидкими частинками (нейтронами, α -частинками, осколками ділення ядер), γ -квантами, а також лазерного опромінення. В результаті, в таких структурах утворюється значна кількість точкових дефектів ($N_{d0} \approx N_{dc}$). В цих умовах важливу роль у просторовому перерозподілі точкових дефектів відіграє їх нелінійна взаємодія із пружним середовищем напруженої гетероструктури.

Наявність в гетероструктурі неоднорідної деформації, створеної як за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і самоорганізованих точкових дефектів призводить до просторового перерозподілу електронів провідності та виникнення електростатичного потенціалу в околі деформаційно-дефектних структур внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку.

Для прогнозованого керування фізичними параметрами напівпровідникових матеріалів напружених гетероструктур, які працюють в умовах інтенсивного опромінення, важливою є інформація про просторовий розподіл концентрації дефектів, параметр кристалічної ґратки, просторовий перерозподіл електронів провідності та електростатичний потенціал.

Тому в четвертому розділі монографії побудовано нелінійну модель самоорганізації дефектно-деформаційних структур з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії в напруженій тришаровій гетероструктурі. В межах цієї моделі:

- розраховано просторовий перерозподіл точкових дефектів та параметра деформації ґратки у напруженій тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів;
- досліджено залежність концентрації точкових дефектів у внутрішньому напруженому шарі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ гетероструктури GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs від його товщини при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів;
- досліджено просторовий розподіл електронів провідності в гетероструктурі GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs з напруженою квантовою ямою $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в залежності від величини неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії;
- розраховано електростатичний потенціал у напруженій гетероструктурі GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs із самоорганізованими дефектно-деформаційними (ДД) структурами при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів;
- встановлено критерії виникнення $n-n^+$ переходів у напружених гетероструктурах із самоорганізованими ДД-структурами при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів.

4.2. Нелінійна модель дифузійно-деформаційного розподілу точкових дефектів у тришаровій гетеросистемі

Розглянемо напружені тришарові гетеросистеми GaAs/InAs/GaAs, ZnTe/CdTe/ZnTe з внутрішніми шарами InAs, CdTe товщиною $2a$ (рис.4.1). Будемо вважати, що зовнішні шари GaAs (ZnTe) не зазнають деформації, оскільки їх товщина значно перевищує ширину внутрішнього шару гетероструктури ($\frac{2a}{L} \ll 1$).

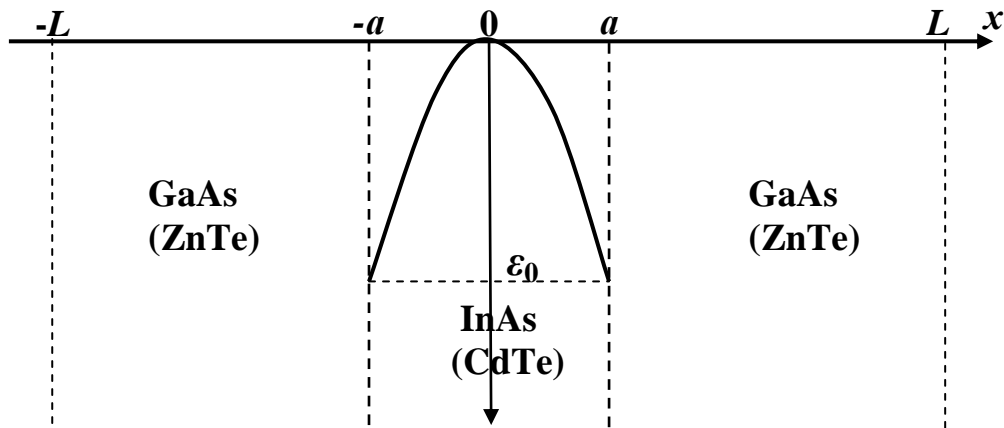


Рис. 4.1. Модель гетероструктур GaAs/InAs/GaAs, ZnTe/CdTe/ZnTe з напруженими шарами InAs, CdTe

Механічна деформація, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми, моделюється функцією:

$$\varepsilon^{(i)}(x) = \begin{cases} \varepsilon_0 \frac{x^2}{a^2}, & i = 2; \\ 0, & i = 1, 3; \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} < 0, \quad \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{a_s - a_0}{a_0}, \quad \varepsilon_{xx} = -\frac{2C_{12}^{(2)}}{C_{11}^{(2)}} \varepsilon_{yy},$$

де $i = 1, 3$ відповідає шарам GaAs (ZnTe), $i = 2$ – внутрішнім шарам InAs (CdTe); a_s і a_0 – параметри кристалічних ґраток відповідно матеріалів GaAs (ZnTe) та InAs (CdTe) гетероструктури; $C_{11}^{(2)}$ та $C_{12}^{(2)}$ – пружні константи матеріалу InAs (CdTe).

Нехай в даній кристалічній системі розподілені точкові дефекти з середньою концентрацією N_{d0} . В результаті їх самоузгодженої взаємодії через поле деформації, створеної як невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми, так і наявністю дефектів відбувається зміна концентраційного профілю точкових дефектів. Для знаходження просторового перерозподілу точкових дефектів необхідно розв'язати зв'язану систему рівнянь для деформації середовища $U(x)$ та концентрації дефектів $N_d(x)$.

Механічне напруження (3.3) гетероструктури з врахуванням неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів записується у вигляді:

$$\sigma(x) = Sn(x) + \rho c_l^2 U(x) - \rho c_l^2 |\alpha| U^2(x) + \rho c_l^2 \beta U^3(x) + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} - \theta_d N_d(x) - \rho c_l^2 \varepsilon^{(i)}(x). \quad (4.2)$$

Підставляючи вираз для напруження гетероструктури (4.2) в рівняння неперервності (2.5), отримуємо стаціонарне рівняння для параметра самоузгодженої деформації з врахуванням ангармонічних доданків, неоднорідності кристалічної структури (наявності напружених гетеромеж) та електрон-деформаційної взаємодії

$$\frac{\partial^2 U^{(i)}(x)}{\partial x^2} + (l_0^{(i)})^2 \frac{\partial^4 U^{(i)}(x)}{\partial x^4} - |\alpha^{(i)}| \frac{\partial^2 \left((U^{(i)}(x))^2 \right)}{\partial x^2} + \beta^{(i)} \frac{\partial^2 \left((U^{(i)}(x))^3 \right)}{\partial x^2} - \frac{\theta_d^{(i)}}{\rho^{(i)} (c_l^{(i)})^2} \frac{\partial^2 N_d^{(i)}(x)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon^{(i)}(x)}{\partial x^2} + \frac{S^{(i)}}{\rho^{(i)} (c_l^{(i)})^2} \frac{\partial^2 n(x)}{\partial x^2} = 0. \quad (4.3)$$

Стаціонарне рівняння дифузії матиме вигляд:

$$D_d^{(i)} \frac{\partial^2 N_d^{(i)}}{\partial x^2} - \frac{D_d^{(i)} \theta_d^{(i)}}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left(N_d^{(i)} \left(\frac{\partial U^{(i)}}{\partial x} + (l_d^{(i)})^2 \frac{\partial^3 U^{(i)}}{\partial x^3} \right) \right) = 0. \quad (4.4)$$

Розв'язок диференціальних рівнянь (4.3), (4.4) шукається у кожній області гетеросистеми з точковими дефектами. На межах шарів повинні виконуватися наступні умови:

$$\left. \begin{aligned} N^{(i)}(\pm\infty) &= N_{d0}; & J^{(1)}(-a) &= J^{(2)}(-a); \\ J^{(i)}(\pm\infty) &= 0; & J^{(3)}(a) &= J^{(2)}(a); \\ N^{(1)}(-a) &= N^{(2)}(-a); & \sigma_{xx}^{(1)}(-a) &= \sigma_{xx}^{(2)}(-a); \\ N^{(3)}(a) &= N^{(2)}(a); & \sigma_{xx}^{(3)}(a) &= \sigma_{xx}^{(2)}(a); \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

де $J^{(i)}(x) = -D_d^{(i)} \frac{\partial N_d^{(i)}}{\partial x} + \frac{D_d^{(i)} \theta_d^{(i)}}{kT} N_d^{(i)} \left(\frac{\partial U^{(i)}}{\partial x} + (l_d^{(i)})^2 \frac{\partial^3 U^{(i)}}{\partial x^3} \right)$ – повний потік

дефектів (перший доданок – звичайний дифузійний (градієнтний) потік дефектів, другий – викликаний самоузгодженою взаємодією як точкових дефектів, так і електронної підсистеми з пружним середовищем гетеросистеми);

$$\sigma_{xx}^{(i)} = \frac{E_i}{(1+\nu_i)(1-2\nu_i)} \left[(1+\nu_i) U_{xx}^{(i)} + \nu_i (U_{yy}^{(i)} + U_{zz}^{(i)}) \right] - \text{нормальна складова}$$

механічної напруги; E_i та ν_i – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона матеріалів гетеросистеми, відповідно; $U_{xx}^{(i)}$, $U_{yy}^{(i)}$, $U_{zz}^{(i)}$ – складові тензора деформації.

Будемо вважати, що кількість дефектів у гетероструктурі залишається незмінною, тобто виконується умова:

$$\int_{-L}^L (N_d(x) - N_{d0}) dx = 0. \quad (4.6)$$

4.3. Розв'язок самоузгодженої системи рівнянь для дифузії дефектів та деформації гетероструктури

Представимо параметр деформації гетероструктури і концентрацію дефектів у вигляді (2.8), (2.9).

Розв'язуючи рівняння (4.4) з врахуванням (2.8), (2.9) в наближенні (2.14), отримуємо вираз для просторово неоднорідної концентрації точкових дефектів (міжвузлових атомів, вакансій) в кожній області напруженої гетеросистеми:

$$N_{dl}^{(i)}(x) = \begin{cases} \frac{\theta_d^{(i)} N_{d0}}{k_B T} \left(U_l^{(i)} + (l_d^{(i)})^2 \frac{\partial^2 U_l^{(i)}}{\partial x^2} \right), & i = 1, 3, \\ \frac{\theta_d^{(i)} N_{d0}}{k_B T} \left(U_l^{(i)} + (l_d^{(i)})^2 \frac{\partial^2 U_l^{(i)}}{\partial x^2} \right) + N^*, & i = 2, \end{cases} \quad (4.7)$$

де N^* – стала інтегрування.

Підставляючи (4.7) в (4.3), отримуємо рівняння для просторово неоднорідної складової параметра деформації матеріалів гетероструктури:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 U_l^{(i)}(x)}{\partial x^2} + (l_d^{(i)})^2 \frac{\partial^4 U_l^{(i)}(x)}{\partial x^4} - |\alpha^{(i)}| \frac{\partial^2 \left((U_l^{(i)}(x))^2 \right)}{\partial x^2} + \beta^{(i)} \frac{\partial^2 \left((U_l^{(i)}(x))^3 \right)}{\partial x^2} - \\ & - \frac{(\theta_d^{(i)})^2 N_{d0}}{\rho^{(i)} (c_l^{(i)})^2 kT} \left(\frac{\partial^2 U_l^{(i)}}{\partial x^2} + (l_d^{(i)})^2 \frac{\partial^4 U_l^{(i)}}{\partial x^4} \right) - \frac{\partial^2 \varepsilon^{(i)}(x)}{\partial x^2} + \frac{S^{(i)}}{\rho^{(i)} (c_l^{(i)})^2} \frac{\partial^2 \Delta n(x)}{\partial x^2} = 0. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Інтегруючи дане рівняння, отримуємо:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 U_l^{(i)}}{\partial x^2} - a^{(i)} U_l^{(i)} + f^{(i)} (U_l^{(i)})^2 - c^{(i)} (U_l^{(i)})^3 = p^{(i)} \frac{S^{(i)}}{\rho^{(i)} c_l^{(i)2}} \Delta n(x) - \\ & - \frac{\varepsilon^{(i)}(x)}{(l_d^{(i)})^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - (l_0^{(i)})^2} + b_1^{(i)} x + b_0^{(i)}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\text{де} \quad a^{(i)} = \frac{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(i)}}}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(i)}} - l_0^{(i)2}}; \quad f^{(i)} = \frac{|\alpha^{(i)}|}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(i)}} - l_0^{(i)2}}; \quad c^{(i)} = \frac{|\beta^{(i)}|}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(i)}} - l_0^{(i)2}};$$

$$p^{(i)} = \frac{1}{l_d^{(i)2} \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(i)}} - l_0^{(i)2}}; \quad N_{dc}^{(i)} = \frac{\rho^{(i)} (c_l^{(i)})^2 k_B T}{(\theta_d^{(i)})^2} \quad - \quad \text{критична концентрація}$$

дефектів для кожного шару гетероструктури; $b_0^{(i)}$, $b_1^{(i)}$ – сталі інтегрування.

Для забезпечення виконання умови $U_l(\pm\infty) = 0$, необхідно, щоб $b_1^{(i)} = 0$ та $b_0^{(i)} = 0$ для $i = 1, 3$.

Розв'язок рівняння (4.9) знаходився у вигляді

$$U_l^{(i)}(x) = U_{ol}^{(i)}(x) + U_{ll}^{(i)}(x)$$

без врахування електрон-деформаційної взаємодії ($n_0 = 0$), де $U_{ol}^{(i)}(x)$ – розв'язок відповідного однорідного рівняння.

Для $i = 1, 3$: $U_l^{(i)}(x) = U_{ol}^{(i)}(x)$. В залежності від величини середньої концентрації точкових дефектів N_{d0} , $U_{ol}^{(i)}(x)$ має вигляд (3.16) – (3.19) для кожного матеріалу гетеросистеми.

Складова параметра деформації внутрішнього шару тришарової гетероструктури $U_{ll}^{(2)}(x)$ знаходилась з рівняння:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 U_{ll}^{(2)}}{\partial x^2} - a^{(2)} U_{ll}^{(2)} + f^{(2)} (U_{ll}^{(2)})^2 + 2f^{(2)} U_{ol}^{(2)} U_{ll}^{(2)} - c^{(2)} (U_{ll}^{(2)})^3 - \\ & - 3c^{(2)} (U_{ol}^{(2)})^2 U_{ll}^{(2)} - 3c^{(2)} U_{ol}^{(2)} (U_{ll}^{(2)})^2 = - \frac{\varepsilon^{(2)}(x)}{(l_d^{(2)})^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}} - (l_0^{(2)})^2} + b_1^{(2)} x + b_0^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Розв'язок рівняння (4.10) знаходився при умові, що складова параметра деформації

$$U_{ll}^{(2)}(x) \ll 1. \quad (4.11)$$

Тоді для оцінки розв'язку параметра деформації $U_{ii}^{(2)}(x)$ квадратичними і кубічними членами можна знехтувати. В цьому випадку рівняння (4.10) прийме вигляд

$$\frac{\partial^2 U_{ii}^{(2)}}{\partial x^2} - a^{(2)} U_{ii}^{(2)} = - \frac{\varepsilon^{(2)}(x)}{\left(l_d^{(2)}\right)^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}} - \left(l_0^{(2)}\right)^2} + b_1^{(2)} x + b. \quad (4.12)$$

Розв'язок рівняння (4.12) залежить від величини просторово однорідного значення концентрації точкових дефектів N_{d0} .

4.4. Просторовий перерозподіл точкових дефектів та деформація матеріалу в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs

З врахуванням формул (2.10), (3.16) – (3.19) та (4.12) просторовий розподіл параметра всебічної деформації $U^{(i)}(x)$ матеріалів тришарової гетероструктури в залежності від середнього значення концентрації точкових дефектів N_{d0} буде мати різний аналітичний вигляд.

Зокрема, у випадку $N_{d0} < N_{dc}$ не відбувається процесу самоорганізації дефектів і їх просторовий перерозподіл відбувається в полі неоднорідної деформації, яка існує в основному тільки за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми. В цьому випадку можна знехтувати нелінійною взаємодією дефектів та дисперсією звуку [75]. Тоді параметр всебічної деформації $U^{(i)}(x)$ матеріалів тришарової гетероструктури буде мати вигляд:

$$U^{(i)}(x) = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_{d0} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \begin{cases} 0, & i = 1, 3 \\ C_1 e^{\sqrt{a_0^{(2)}} x} + C_2 e^{-\sqrt{a_0^{(2)}} x} + \frac{\varepsilon_0 \frac{x^2}{a^2}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}} + b_1 x + b_0, & i = 2 \end{cases}, \quad (4.13) \\
 \text{де } a_0^{(2)} &= \frac{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}}
 \end{aligned}$$

При $N_{d0} > N_{dc1}$ має місце нелінійна взаємодія точкових дефектів з пружним середовищем гетероструктури. Тоді параметр всебічної деформації $U^{(i)}(x)$ матеріалів тришарової гетероструктури буде мати вигляд:

$$\begin{aligned}
 & \frac{N_{dc1}^{(i)} < N_{d0} < N_{dc2}^{(i)}}{U^{(i)}(x) = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_{d0} + \text{sign} \theta_d^{(i)} \frac{A^{(i)}}{B^{(i)} + \text{sh}(-\sqrt{a^{(i)}} x)} +} \\
 & + \begin{cases} 0, & i = 1, 3 \\ C_1(N_{d0}) e^{-\sqrt{a^{(2)}} x} + C_2(N_{d0}) e^{\sqrt{a^{(2)}} x} + \frac{\varepsilon_0 \frac{x^2}{a^2}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}} + b_1 x + b_0, & i = 2 \end{cases} \quad (4.14) \\
 & \frac{N_{dc2}^{(i)} < N_{d0} < N_{dc}^{(i)}}{U^{(i)}(x) = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_{d0} + \text{sign} \theta_d^{(i)} \frac{A^{(i)}}{B^{(i)} + \text{ch}(\sqrt{a^{(i)}} x)} +}
 \end{aligned}$$

$$+ \begin{cases} 0, & i = 1, 3 \\ C_1(N_{d0})e^{-\sqrt{a^{(2)}}x} + C_2(N_{d0})e^{\sqrt{a^{(2)}}x} + \frac{\varepsilon_0 \frac{x^2}{a^2}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}} + b_1 x + b_0, & i = 2 \end{cases} \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} & \underline{N_{d0} > N_{dc}^{(i)}} \\ & U^{(i)}(x) = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_{d0} + \text{sign} \theta_d^{(i)} \frac{A^{(i)}}{B^{(i)} + \sin(\sqrt{|a^{(i)}|}x)} + \\ & + \begin{cases} 0, & i = 1, 3 \\ C_1(N_{d0})\sin \sqrt{a^{(2)}}x + C_2(N_{d0})\cos \sqrt{a^{(2)}}x + \frac{\varepsilon_0 \frac{x^2}{a^2}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}^{(2)}}} + b_1 x + b_0, & i = 2 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Просторовий розподіл точкових дефектів у напруженій гетероструктурі визначається формулою (4.7). Сталі інтегрування N^* , C_1 , C_2 , b_0 , b_1 знаходяться з граничних умов (4.5), (4.6).

У випадку, коли $N_{d0} < N_{dc1}$, результати розрахунку координатної залежності параметра деформації та концентрації дефектів виду центру розтягу якісно співпадають з результатами, отриманими в розділі 2 (рис.2.6-2.9).

В діапазоні середніх значень концентрацій $N_{d0} < N_{dc1}$ міжвузлові атоми ($\theta_d > 0$) накопичуються у внутрішніх напружених шарах InAs, CdTe тришарових гетероструктур GaAs/InAs/GaAs, ZnTe/CdTe/ZnTe.

На рис.4.2 представлено просторовий розподіл вакансій у напруженій тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях їх середньої концентрації в діапазоні $N_{d0} < N_{dc1}$. Як бачимо, у внутрішньому напруженому шарі, який зазнає деформації стиску за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетероструктури ($\varepsilon_0 < 0$), концентрація вакансій ($\theta_d < 0$) зменшується відносно її середнього значення.

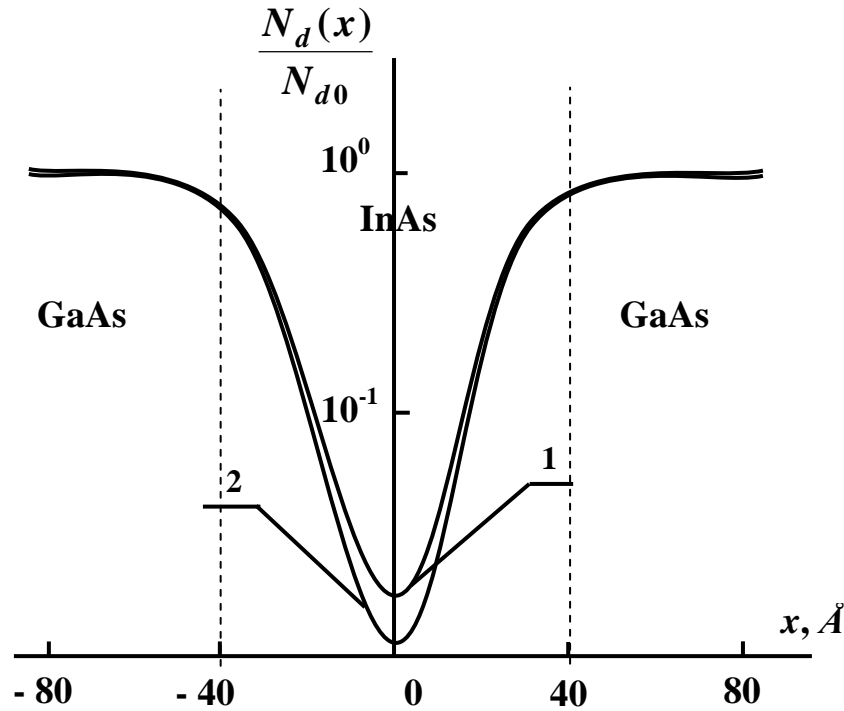


Рис.4.2. Просторовий розподіл точкових дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$) у тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях середньої концентрації N_{d0} :

$$1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.003; \quad 2 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.03$$

Причому, зменшення числа дефектів виду центру стиску відносно їх просторово однорідного значення зростає із збільшенням середньої концентрації N_{d0} .

Це явище можна пояснити тим, що деформаційний потік дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$) напрямлений в сторону зменшення деформації $\left(j \sim -\frac{dU^{(i)}(x)}{dx} \right)$ і в результаті призводить до витіснення вакансій з внутрішнього шару.

Самоузгоджений просторовий перерозподіл вакансій (рис.4.2) в деформаційному полі, створеному невідповідністю ґраток контактуючих матеріалів, є причиною зміни параметра деформації $U^{(i)}(x)$ (рис.4.3). В заданому діапазоні концентрацій точкових дефектів

$N_{d0} < N_{dc1}$ складова параметра деформації, яка виникає за рахунок наявності вакансій, є незначною, і тому деформація матеріалу внутрішнього шару InAs тришарової гетероструктури GaAs/InAs/GaAs в основному визначається неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів тришарової гетероструктури (рис.4.3).

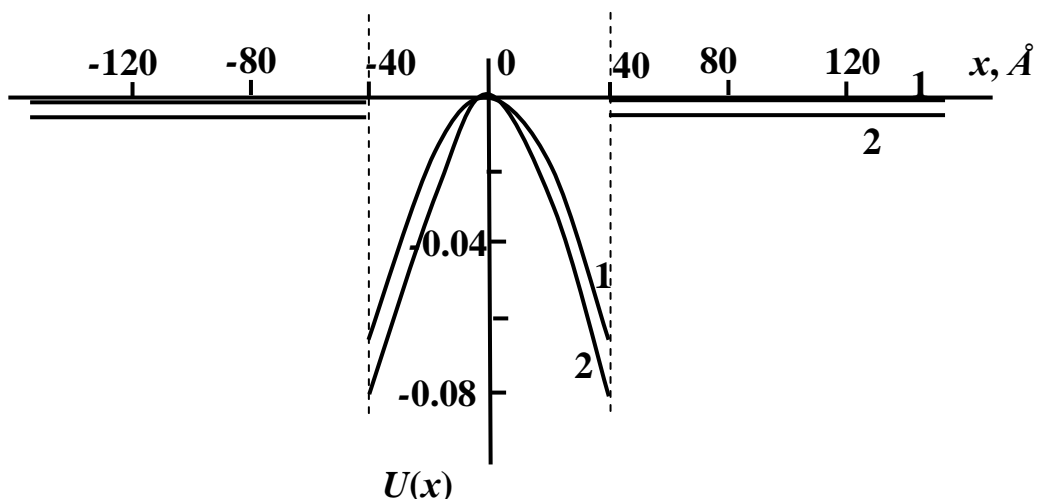


Рис.4.3. Координатна залежність параметра деформації у тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$):

$$1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.003; \quad 2 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.03$$

Розглянемо випадок самоорганізації точкових дефектів в гетеросистемі, коли їх середня концентрація знаходиться в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$.

У цьому випадку умова (4.11) добре виконується для тришарової гетеросистеми GaAs/InAs/GaAs з внутрішнім шаром InAs шириною $a > 100 \text{ Å}$.

На рис.4.4, 4.5 представлені результати обчислень координатних залежностей концентрації точкових дефектів $N_d(x)$ виду центру розтягу та параметра деформації $U(x)$ для діапазону $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ у тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях ширини внутрішнього шару.

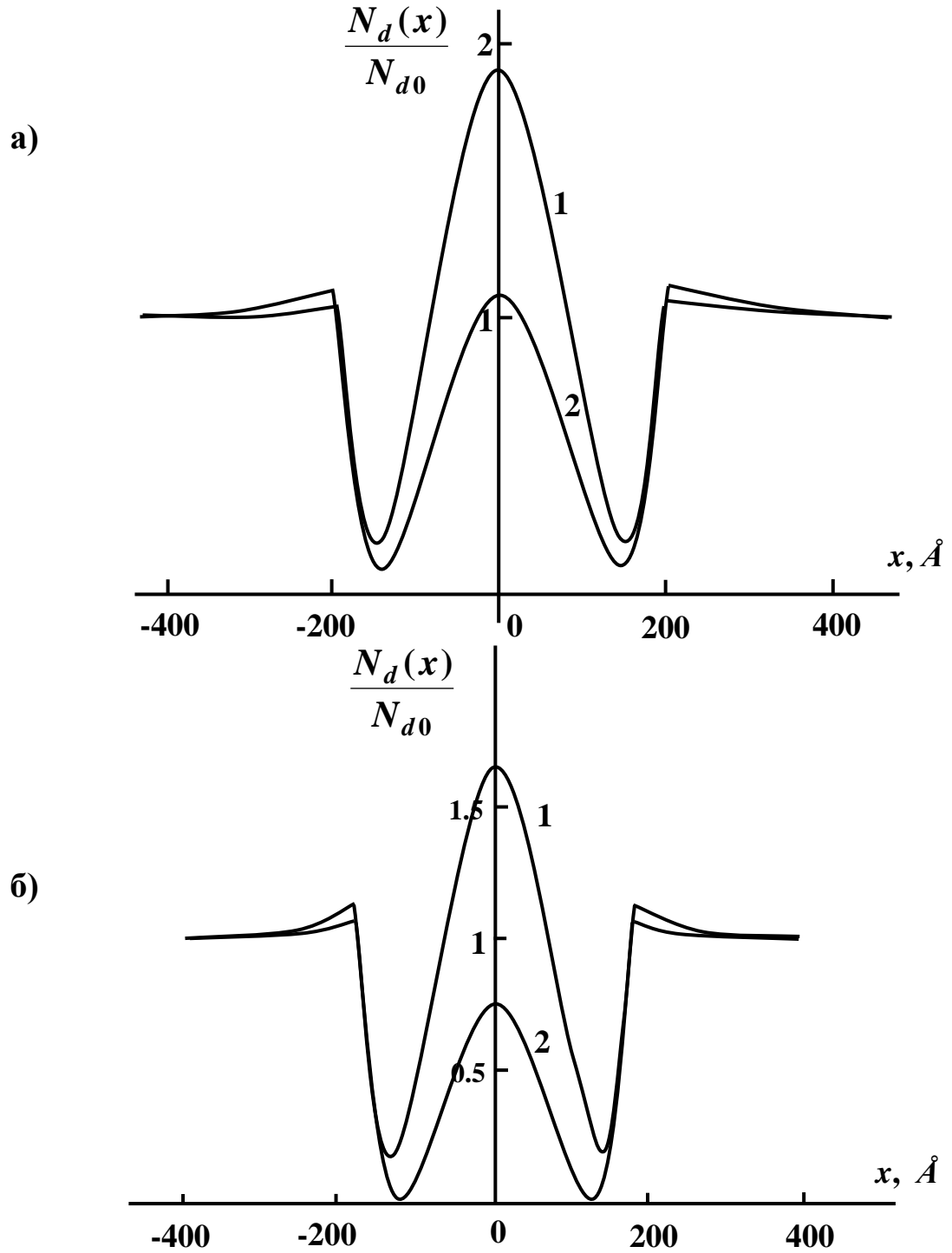


Рис.4.4. Перерозподіл точкових дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях

їх середньої концентрації N_{d0} : **1** – $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$; **2** – $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$;

а) $2a = 400 \text{ \AA}$; **б)** $2a = 360 \text{ \AA}$

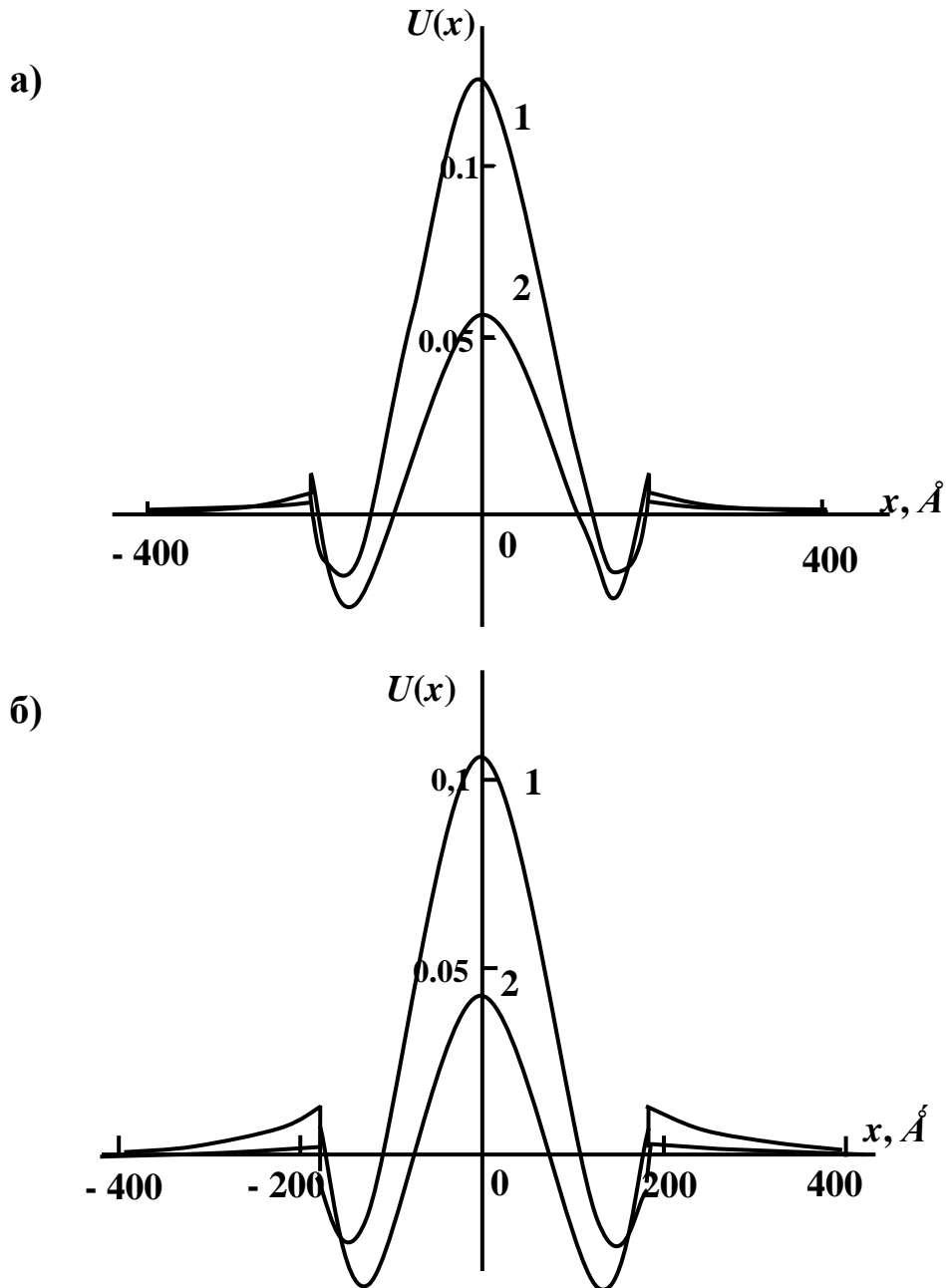


Рис.4.5. Координатна залежність параметра деформації в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів N_{d0}

виду центру розтягу ($\theta_d > 0$):

$$1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59; \quad 2 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79;$$

а) $2a = 400 \text{ Å};$

б) $2a = 360 \text{ Å}$

В середині структури ($x = 0$) та на гетеромежах ($x = \pm a$) спостерігається зростання концентрації точкових дефектів виду центру розтягу відносно її середнього значення N_{d0} , і, навпаки, в околі площин $x = \pm 160 \text{ \AA}$ кількість дефектів різко зменшується. При збільшенні середньої концентрації точкових дефектів в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ область накопичення дефектів зміщується від центру внутрішнього шару InAs до його меж. При зменшенні ширини внутрішнього шару тришарової гетероструктури GaAs/InAs/GaAs від 400 \AA до 360 \AA спостерігається зменшення концентрації точкових дефектів та величини деформації розтягу в центрі такої структури на $\sim 20\%$ і, відповідно, незначне їх зростання у зовнішніх шарах (рис.4.4, 4.5).

Характер розподілу точкових дефектів у гетероструктурі визначається просторовим розподілом параметра деформації (рис.4.5). Деформаційний потік дефектів напрямлений із більш стиснутої області гетероструктури в область, що зазнає деформації розтягу, і тому точкові дефекти виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) накопичуються в тій частині матеріалу, що зазнає всебічної деформації розтягу.

Деформація ґратки гетероструктури зумовлена двома самоузгодженими факторами: 1) неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів; 2) просторовим перерозподілом точкових дефектів (міжвузлових атомів, вакансій).

Поблизу границь гетероструктури визначальним є перший фактор (рис.4.5), і тому кристалічна ґратка зазнає деформації стиску. При віддаленні від гетеромежі до середини внутрішнього шару кристалічної структури складова деформації, яка зумовлена неузгодженням параметрів ґраток, зменшується, і характер деформації ґратки практично визначається самоузгодженим перерозподілом точкових дефектів.

Як бачимо з рис.4.4, 4.5 у внутрішньому напруженому шарі InAs тришарової гетероструктури GaAs/InAs/GaAs, зменшуються як концентрація міжвузлових атомів, так і величина параметра деформації при зменшенні ширини цього шару.

На рис.4.6 представлено залежність середньої концентрації точкових дефектів виду центру розтягу $\bar{N}_d^{(2)} = \frac{\int_a^a N_d(x)}{2a}$ в напруженій квантовій ямі (в шарі InAs) від її ширини при різних значеннях просторово-однорідної концентрації точкових дефектів N_{d0} у гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs.

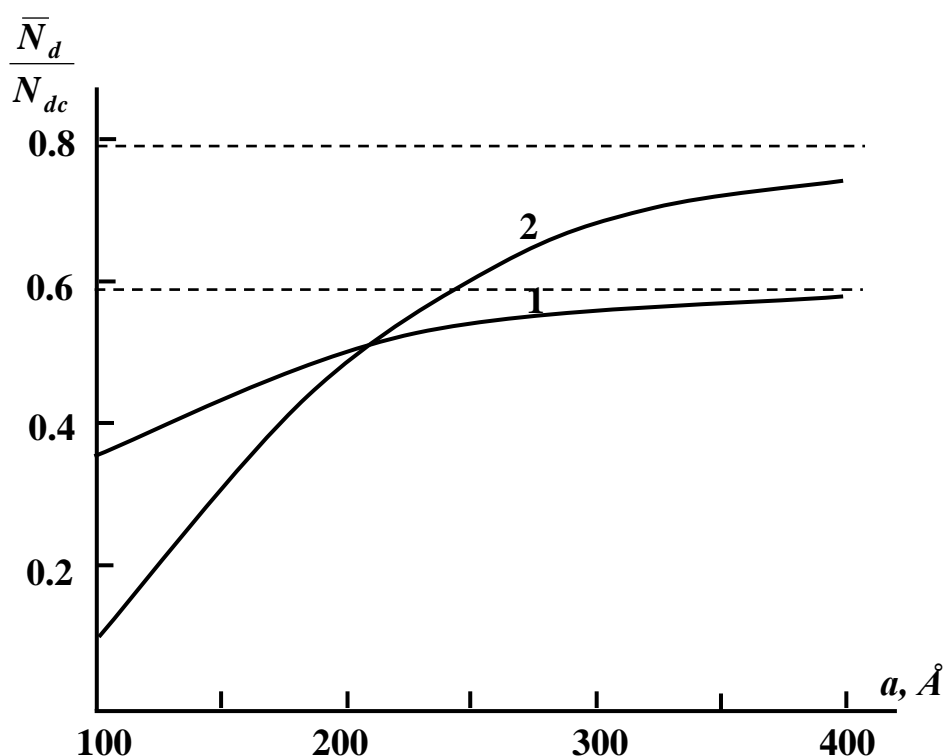


Рис.4.6 Залежність концентрації дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) у внутрішньому шарі InAs від його ширини при різних значеннях просторово однорідної концентрації N_{d0} :

$$1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59; \quad 2 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$$

Величина зменшення кількості точкових дефектів у внутрішньому напруженому шарі порівняно з просторово-однорідним розподілом залежить як від розміру внутрішнього шару, так і від величини середньої концентрації міжвузлових атомів. Зокрема, у напруженому шарі InAs товщиною $2a = 360 \text{ \AA}$ число дефектів $\bar{N}_d^{(2)}$ зменшується на 47% при середній концентрації $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$ відносно його просторово однорідного значення N_{d0} , а при $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$ – на 15%.

Як бачимо з рис.4.6, із зростанням ширини внутрішнього шару число дефектів у напруженій квантовій ямі монотонно збільшується для всіх середніх значень концентрації точкових дефектів в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ і наближається до свого просторово однорідного значення $(\bar{N}_d^{(2)}|_{a \rightarrow \infty} \rightarrow N_{d0})$. А саме, при збільшенні ширини внутрішнього напруженого шару InAs від $2a = 360 \text{ \AA}$ до $2a = 450 \text{ \AA}$ кількість точкових дефектів ($\theta_d > 0$) в ньому зростає на 21% ($\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$) відносно середнього значення.

При ширині внутрішнього шару InAs $2a < 400 \text{ \AA}$ у тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs в результаті самоузгодженого дифузійно-деформаційного перерозподілу при зростанні просторово-однорідної концентрації дефектів N_{d0} в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ число дефектів $\bar{N}_d^{(2)}$ в квантовій ямі зменшується. Для $2a > 400 \text{ \AA}$ спостерігається протилежний ефект. Аналогічно, параметр всебічної деформації розтягу матеріалу квантової ями шириною $2a < 400 \text{ \AA}$ зменшується при зростанні в гетероструктурі просторово-однорідної концентрації точкових дефектів N_{d0} виду центру розтягу. Таким чином, квантова яма з напруженими границями (робоча область гетероструктури) при зростанні середньої концентрації точкових

дефектів N_{d0} в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ стає більш структурно досконалою, на відміну від випадку, коли $N_{d0} < N_{dc1}$.

Зменшення концентрації дефектів в активній області гетероструктури (квантовій ямі) підтверджується в експериментальній роботі [94] по вимірюванню інтенсивності фотолюмінісценції в гетеросистемі GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As з квантовою ямою GaAs. Зокрема, в цій роботі показано, що інтенсивність фотолюмінісценції в гетеросистемі GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As з напруженими шарами In_{0.2}Ga_{0.8}As є більшою, ніж у цій ж гетеросистемі без напружених шарів.

У гетероструктурі з внутрішнім напруженим шаром ($\varepsilon_0 > 0$), який зазнає деформації розтягу, середня концентрація дефектів виду центру розтягу в цьому шарі практично не змінюється порівняно з їх просторово-однорідним розподілом.

На рис.4.7 представлено концентраційний профіль точкових дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$) в напруженій тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних середніх значеннях концентрації дефектів N_{d0} в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$. Така залежність характеризується трьома концентраційними максимумами: в центрі внутрішнього шару гетероструктури ($x = 0$) та на його межах ($x = \pm a$).

Збільшення середньої концентрації дефектів від $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$ до

$\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$ призводить до зменшення концентрації вакансій в центрі

шару InAs і до збільшення – на його межах. Причому, значення середньої концентрації дефектів $\bar{N}_d^{(2)}$ у шарі InAs практично не відрізняється від величини середньої концентрації дефектів N_{d0} . А максимальне відхилення концентрації точкових дефектів виду центру стиску не перевищує 27% ($\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$) відносно її просторово однорідного значення N_{d0} .

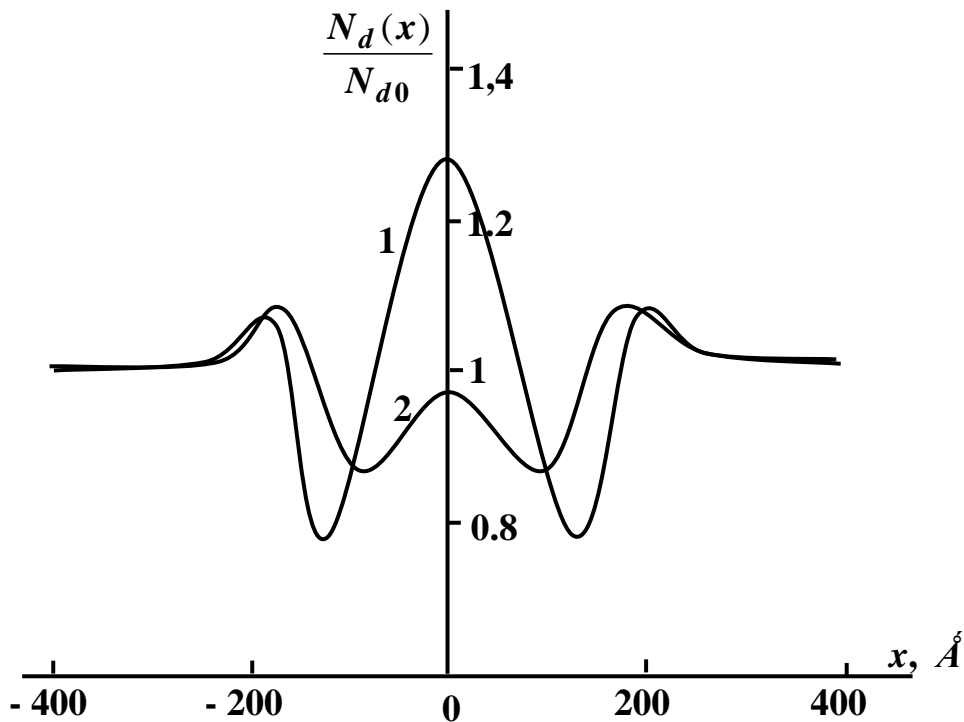


Рис.4.7. Перерозподіл точкових дефектів виду центру стиску
 $(\theta_d < 0, 2a = 360 \text{ Å})$
 в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях

їх середньої концентрації N_{d0} : **1** – $\frac{N_{d0}}{N} = 0.59$; **2** – $\frac{N_{d0}}{N} = 0.79$

Просторові розподіли вакансій (рис.4.7) та міжвузлових атомів (рис.4.4) при однакових умовах якісно не відрізняються один від одного. Однак, для дефектів виду центру розтягу спостерігається значне зменшення їх концентрації у внутрішньому напруженому шарі ($\varepsilon_0 < 0$) тришарової гетероструктури, а концентрація дефектів виду центру стиску близька до її просторово однорідного значення.

Координатний розподіл вакансій повністю визначається самоузгодженим параметром деформації напруженої гетеросистеми з дефектно-деформаційними структурами (рис.4.8). Деформаційний потік точкових дефектів виду центру стиску спрямований в сторону зменшення напруження матеріалу, що призводить до накопичення вакансій в тих областях матеріалу, які зазнають деформації стиску.

Із збільшенням середньої концентрації точкових дефектів виду центру стиску в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ в околі площини $x = 0$ спостерігається зміна характеру деформації із стиску на розтяг (рис.4.8, криві 1, 2). Це пов'язано із зменшенням концентрації вакансій в центрі внутрішнього шару тришарової гетероструктури (рис.4.7).

У тришаровій гетероструктурі з внутрішнім напруженим шаром, що зазнає деформації розтягу за рахунок невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів ($\varepsilon_0 > 0$), просторовий розподіл вакансій при однакових умовах аналогічний розподілу міжвузлових атомів для випадку стиснутого внутрішнього шару ($\varepsilon_0 < 0$).

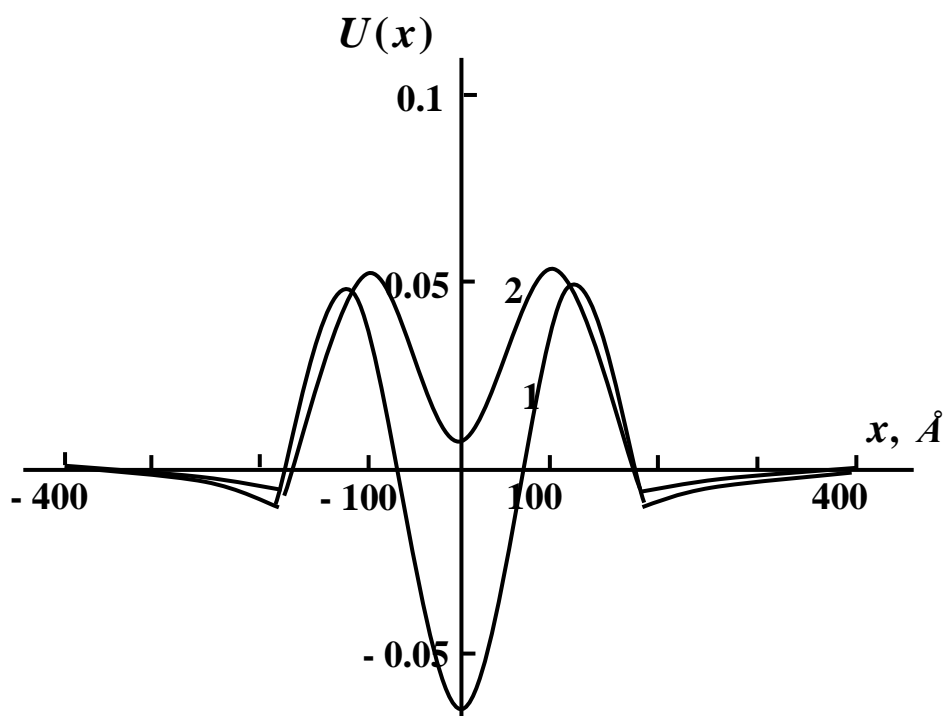


Рис.4.8. Координатна залежність параметра деформації в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів N_{d0}

виду центру стиску ($\theta_d < 0$, $2a = 360 \text{ Å}$):

$$1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59; \quad 2 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$$

Проаналізувавши отримані результати, можна зробити висновок, що для досліджуваного діапазону концентрацій точкових дефектів $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ в залежності від співвідношення між знаками параметрів ε_0 та θ_d число дефектів у внутрішньому напруженому шарі буде зменшуватись відносно їх просторово однорідного значення N_{d0} або наближатись до нього. Зокрема, якщо знаки параметрів ε_0 (невідповідність параметрів ґраток контактуючих матеріалів) та θ_d протилежні, то дефекти накопичуються у зовнішніх слабо напружених шарах гетеросистеми і, відповідно, у внутрішньому напруженому шарі їх концентрація зменшується відносно середнього значення N_{d0} . А у випадку однакових знаків параметрів ε_0 та θ_d концентрація дефектів у всіх шарах тришарової гетероструктури практично не відрізняється від її просторово однорідного значення.

При перевищенні критичної концентрації N_{cd} взаємодія системи точкових дефектів з пружним середовищем призводить до утворення періодичних дефектно-деформаційних структур (формула 4.16).

4.5. Вплив електрон-деформаційної взаємодії на формування n - n^+ переходів у тришарових гетеро структурах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами

У тришаровій гетероструктурі із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами виникає неоднорідна деформація (формули (4.13) – (4.16)), створена як за рахунок просторового перерозподілу точкових дефектів, так і неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів. Це призводить до деформації зони провідності, і, відповідно, до зміни концентрації носіїв струму та виникнення електростатичного потенціалу. Розподіл концентрації електронів та потенціал електричного поля вздовж осі гетероструктури

знаходиться з розв'язку самоузгодженої системи рівнянь (4.9), (3.6) – (3.9).

Потенціальна енергія для електронів провідності у тришаровій гетеросистемі із самоорганізованими ДД-структурами описується співвідношенням:

$$W^{(i)}(x) = \begin{cases} S^{(i)}U^{(i)}(x), & i = 1, 3 \\ \Delta E_c + S^{(i)}U^{(i)}(x), & i = 2 \end{cases} \quad (4.17)$$

де $S^{(i)}$ – всебічна константа деформаційного потенціалу зони провідності i -го матеріалу; ΔE_c – розрив зон провідності контактуючих матеріалів гетеросистеми.

Відлік енергій проводиться від дна зони провідності недеформованого матеріалу широкозонного напівпровідника (GaAs, ZnTe). Потенціальна енергія електрона в квантовій ямі складається з двох доданків: 1) розриву зон провідності ΔE_c контактуючих матеріалів гетеросистеми; 2) зсуву дна зони провідності під дією як механічної деформації, спричиненої наявністю точкових дефектів і неузгодженням параметрів ґраток, так і електронної складової деформації, що виникає за рахунок просторового перерозподілу електронів провідності $\Delta n^{(i)}(x)$ внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку [122].

Зміна концентрації електронів провідності $\Delta n^{(i)}(x)$ визначається у лінійному наближенні співвідношенням [122]

$$\Delta n^{(i)}(x) = R_s^{(i)}(e\varphi^{(i)}(x) - W^{(i)}(x)), \quad (4.18)$$

яке виконується при умові, що потенціальна енергія $W^{(i)}(x)$ того ж порядку, що і енергія електростатичної взаємодії, тобто

$$\frac{e\varphi^{(i)}(x) - W^{(i)}(x)}{W^{(i)}(x)} \ll 1.$$

Із врахуванням (4.18) рівняння Пуассона (3.8) в кожному шарі гетероструктури набуває вигляду:

$$\Delta\varphi^{(i)}(x) - g_s^{(i)2}\varphi^{(i)}(x) = - \frac{S^{(i)}g_s^{(i)2}}{e}U^{(i)}(x), \quad i = 1, 3 \quad (4.19)$$

$$\Delta\varphi^{(i)}(x) - g_s^{(i)2}\varphi^{(i)}(x) = -\frac{S^{(i)}g_s^{(i)2}}{e}U^{(i)}(x) - \frac{\Delta E_c g_s^{(i)2}}{e}, \quad i=2 \quad (4.20)$$

де $g_s^{(i)}$ визначається формулою (3.14).

Розв'язки рівнянь (4.19), (4.20) повинні задовольняти наступним граничним умовам:

$$\begin{cases} \varphi^{(1)}(-a) = \varphi^{(2)}(-a); & \varepsilon_1 \frac{d\varphi^{(1)}(-a)}{dx} = \varepsilon_2 \frac{d\varphi^{(2)}(-a)}{dx}; \\ \varphi^{(3)}(a) = \varphi^{(2)}(a); & \varepsilon_3 \frac{d\varphi^{(3)}(a)}{dx} = \varepsilon_2 \frac{d\varphi^{(2)}(a)}{dx}; \\ \varphi^{(1)}\big|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{d\varphi^{(1)}}{dx}\big|_{x \rightarrow -\infty} = 0; & \varphi^{(3)}\big|_{x \rightarrow \infty} = \frac{d\varphi^{(3)}}{dx}\big|_{x \rightarrow \infty} = 0. \end{cases} \quad (4.21)$$

Розв'язки рівнянь Пуассона (4.19), (4.20) мають вигляд:

$$\begin{aligned} \varphi^{(i)}(x) = & C_1^{(i)} e^{g_s^{(i)}x} + C_2^{(i)} e^{-g_s^{(i)}x} - \left\{ \frac{S^{(i)}g_s^{(i)}}{2e} e^{g_s^{(i)}x} \int U^{(i)}(x) \cdot e^{-g_s^{(i)}x} dx \right. \\ & + \left. \frac{S^{(i)}g_s^{(i)}}{2e} e^{g_s^{(i)}x} \int (U^{(i)}(x) + \frac{\Delta E_c}{S^{(i)}}) \cdot e^{-g_s^{(i)}x} dx \right. \\ & + \left\{ \begin{array}{ll} \frac{S^{(i)}g_s^{(i)}}{2e} e^{-g_s^{(i)}x} \int U^{(i)}(x) \cdot e^{g_s^{(i)}x} dx, & i=1, 3 \\ \frac{S^{(i)}g_s^{(i)}}{2e} e^{-g_s^{(i)}x} \int (U^{(i)}(x) + \frac{\Delta E_c}{S^{(i)}}) \cdot e^{g_s^{(i)}x} dx & i=2 \end{array} \right. \end{aligned} \quad (4.22)$$

де константи шукаються з граничних умов (4.21).

У першому наближенні параметр деформації $U^{(i)}(x)$ матеріалу гетеросистеми знаходився без врахування електрон-деформаційної взаємодії і описується формулами (4.13 – 4.16) в залежності від середньої концентрації точкових дефектів N_{d0} .

Підставивши (4.22) в (4.18), отримаємо формулу для визначення просторового перерозподілу носіїв струму в тришаровій напруженій гетеросистемі з точковими дефектами (міжвузловими атомами та вакансіями).

Таким чином, в гетеросистемах з дефектно-деформаційними структурами виникають n - n^+ переходи як за рахунок різних електронних характеристик контактуючих напівпровідникових матеріалів, так і за

рахунок самоузгодженої взаємодії електронної підсистеми з пружно-деформованим середовищем гетероструктури.

Розрахунок концентраційного профілю електронів та координатної залежності електростатичного потенціалу вздовж осі гетероструктури проводився для кристалічної системи GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs при різних значеннях середньої концентрації точкових дефектів N_{d0} в залежності від вмісту In у внутрішньому напруженому шарі In_xGa_{1-x}As.

Розрив зон провідності контактуючих матеріалів гетероструктури GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs в залежності від величини неузгодження параметрів ґраток (від вмісту In у внутрішньому шарі In_xGa_{1-x}As) апроксимувався лінійною залежністю

$$\Delta E_c(\mathbf{x}) = \Delta E_c(l) \cdot \mathbf{x},$$

де $\Delta E_c(l) = -0.83 \text{ eV}$ – розрив зон провідності матеріалів GaAs та InAs [140].

На рис.4.9 представлено координатну залежність потенціалу електростатичного поля в гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs із середньою концентрацією точкових дефектів $N_{d0} = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ($N_{d0} < N_{dc1}$) при різних значеннях x вмісту In у внутрішньому шарі In_xGa_{1-x}As шириною $2a = 80 \text{ Å}$. З віддаленням від центру внутрішнього шару гетероструктури електростатичний потенціал монотонно збільшується і наближається до просторово однорідного значення SU_0 .

При збільшенні долі In (збільшенні величини неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів) від $x = 0.145$ до $x = 0.29$ глибина потенціальної ями зменшується від 115 мВ до 93 мВ . Порівнюючи криві 1 та 1' (рис.4.9), бачимо, що деформаційні ефекти призводять до зменшення глибини потенціальної ями. Це пов'язано з тим, що при концентраціях дефектів $N_{d0} < 10^{18} \text{ см}^{-3}$ визначальною є складова деформації кристалічної ґратки, зумовлена неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, яке призводить до деформації стиску і, відповідно, до зменшення глибини потенціальної ями (формула 4.17).

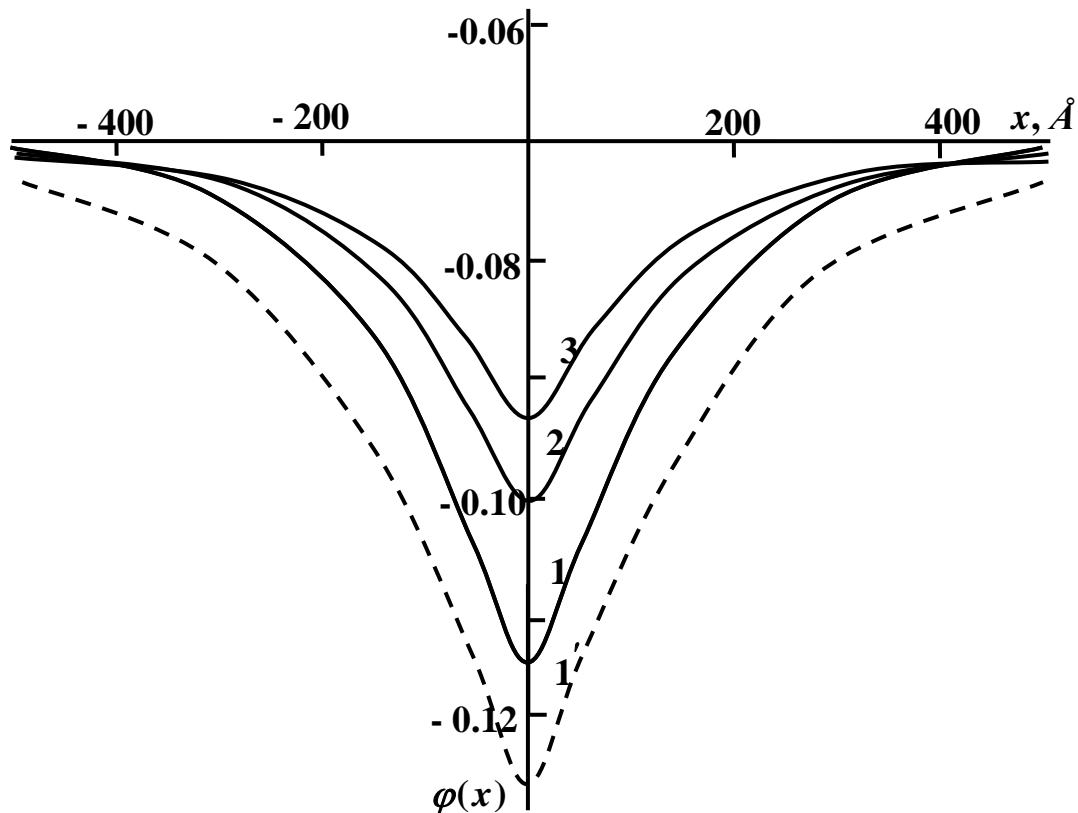


Рис.4.9 Координатна залежність електростатичного потенціалу в гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs:
 1 – $x = 0.145$; 2 – $x = 0.2$; 3 – $x = 0.29$;
 1' – без врахування деформаційних ефектів

На рис.4.10 представлено результати теоретичних розрахунків та експериментальних досліджень [112] концентраційних профілів носіїв струму в n - n^+ гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з квантовою ямою In_xGa_{1-x}As при різних значеннях параметра x . Експериментально спостережений концентраційний профіль основних носіїв струму визначався методом вольт-фарадних характеристик [113]. Теоретичні розрахунки проводились для концентрації електронів $n_0 = 0.7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ та середньої концентрації точкових дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$) $N_{d0} = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Це пов'язано з тим, що досліджувані зразки були леговані кремнієм, який при заміщенні атомів галію діє як центр стиску (іонний радіус атомів кремнію $r = 1.17 \text{ Å}$ є менший від іонного радіуса атомів галію $r = 1.58 \text{ Å}$).

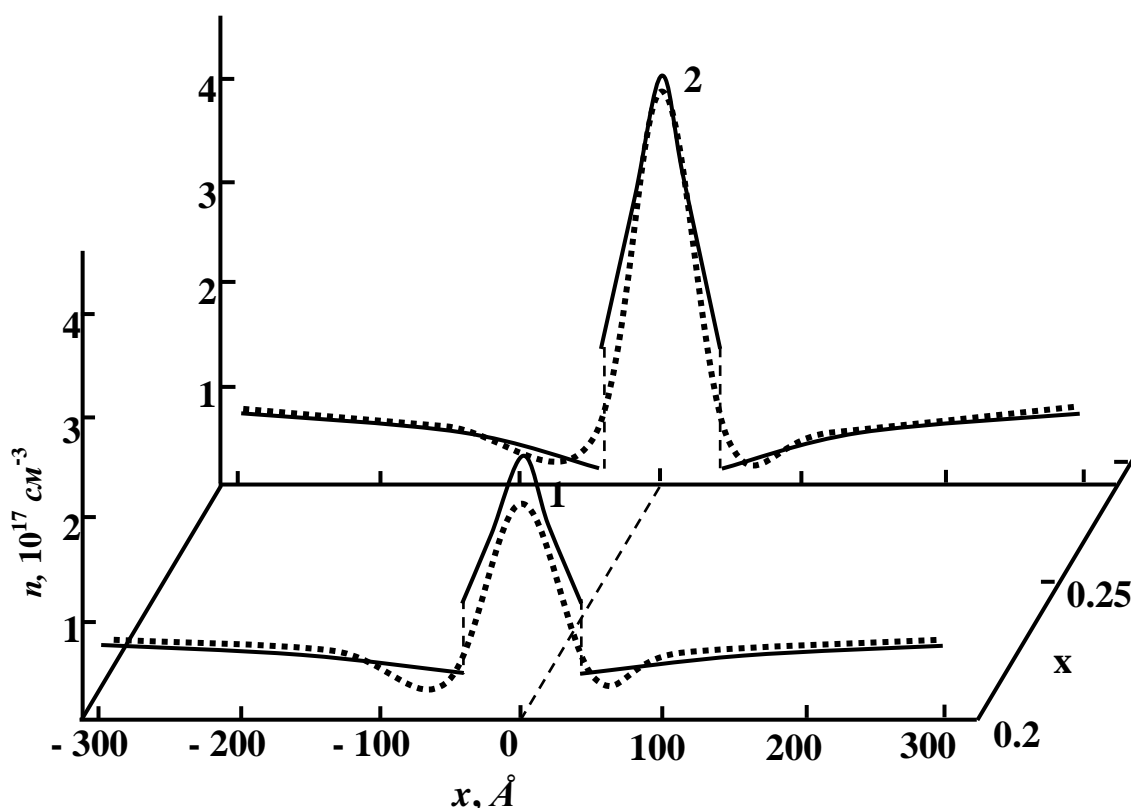


Рис.4.10. Просторовий розподіл електронів
в гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з квантовою ямою In_xGa_{1-x}As
1 – x = 0.2; 2 – x = 0.29;
суцільна лінія відповідає результатам теоретичних розрахунків;
пунктирна лінія відповідає результатам
експериментальних досліджень [96]

Як бачимо з рис.4.10, спостерігається добре узгодження теоретичних розрахунків і експериментальних даних при значному неузгодженні контактуючих матеріалів (x = 0.29). При зменшенні долі In у внутрішньому напруженому шарі In_xGa_{1-x}As тришарової гетероструктури до x = 0.2 розбіжність теоретичних і експериментальних даних в центрі зростає до 15%.

Розрив координатної залежності концентрації електронів на межах гетероструктури пояснюється неврахуванням в межах даної моделі перехідного шару, а саме, параметр деформації $\varepsilon^{(i)}(x)$, яка виникає за

рахунок невідповідності параметрів ґраток моделювався на межах контактуючих шарів стрибкоподібною функцією (формула (4.1)).

Як бачимо з рис.4.10, електрони локалізуються в межах квантової ями $(-40 \text{ \AA} < x < 40 \text{ \AA})$ і з віддаленням від гетеромеж $(\frac{x}{a} \gg 1)$ їх концентрація наближається до просторово однорідного значення $n_0 = 0.7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Деформація матеріалів гетероструктури, яка створюється в основному невідповідністю параметрів ґраток, при середній концентрації точкових дефектів виду центру стиску $N_{d0} = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ($N_{d0} < N_{dc1}$) призводить до зменшення ступеня просторової локалізації основних носіїв струму, що пов'язане із зменшенням глибини потенціальної ями.

При однаковій концентрації легуючих домішок (наприклад, кремнію) концентрація електронів в квантовій ямі суттєво залежить від складу її матеріалу. Зокрема, при $x = 0.29$ амплітуда концентраційного піку є в 6 разів більшою від просторово однорідного значення концентрації електронів n_0 . Зменшення вмісту In у внутрішньому шарі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ напруженої гетероструктури $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ до $x = 0.2$ призводить до зменшення амплітуди концентраційного піку відносно середнього значення числа електронів в 1.6 разів. При подальшому зменшенні вмісту In концентраційний пік зникає і концентрація електронів практично не відрізняється від просторово-однорідного значення носіїв струму.

Збільшення середньої концентрації дефектів виду центру стиску ($\theta_d < 0$) в діапазоні $N_{d0} < N_{dc1}$ призводить до незначного відносного розтягу (рис.4.3, крива 2) кристалічної ґратки поблизу центру квантової ями тришарової структури за рахунок зменшення в ній концентрації точкових дефектів ($\theta_d < 0$), що, в свою чергу, є причиною збільшення глибини потенціальної ями $W^{(i)}$ ($S^{(i)}U^{(i)}(x) < 0$). В результаті цього зростає ступінь просторової локалізації електронів у напруженій квантовій ямі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ гетеросистеми $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

При наявності точкових дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) із середньою концентрацією $N_{d0} < N_{dc1}$ картина якісно не зміниться. Це пояснюється тим, що при зростанні концентрації центрів розтягу у цьому діапазоні зростатиме глибина потенціальної ями і, відповідно, ступінь просторової локалізації електронів в центрі квантової ями.

Необхідно зазначити, що середнє значення концентрації дефектів виду центру стиску у напруженій квантовій ямі в результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу є значно меншим у порівнянні із своїм просторово-однорідним значенням (рис.4.2). І тому зростання концентрації вакансій у діапазоні $N_{d0} < N_{dc1}$ у гетероструктурі практично не впливає на формування n - n^+ переходів.

Для того, щоб встановити роль електрон-деформаційних ефектів у формуванні n - n^+ переходів у гетероструктурах з напруженими квантовими ямами, прослідкуємо за зміною концентраційних профілів електронів для різних середніх значень носіїв струму при зростанні концентрації точкових дефектів як виду центру розтягу, так і центру стиску.

На рис.4.11 представлено координатну залежність зміни концентрації електронів $\frac{\Delta n(x)}{n_0}$ відносно їх просторово однорідного розподілу в напруженій тришаровій гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs з концентрацією дефектів виду центру розтягу в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ (симетричний кластер, $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$) при різних значеннях середньої концентрації основних носіїв струму n_0 .

Як показують результати числових розрахунків (рис.4.11), електрони локалізуються в основному в центрі квантової ями гетероструктури, де їх концентрація відповідно зростає в 7 та 5 разів при $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ та $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ порівняно з просторово однорідним значенням. Крім цього, спостерігаються ще два концентраційні піки на межах напруженої квантової ями тришарової структури, де концентрація носіїв струму зростає в середньому в 2.5

разів відносно середньої концентрації. Такий просторовий перерозподіл електронів провідності пояснюється зміною глибини потенціальної ями (рис.4.5) під впливом самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів.

В областях гетероструктури, які зазнають деформації розтягу за рахунок значної концентрації дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) (рис. 4.5), глибина потенціальної ями $W^{(i)}$ зростає ($S^{(i)}U^{(i)}(x) < 0$), що призводить до збільшення ступеня просторової локалізації носіїв струму. І, навпаки, в околі площин $x = \pm 160 \text{ \AA}$, де матеріал гетероструктури зазнає деформації стиску, глибина потенціальної ями для електронів зменшується ($S^{(i)}U^{(i)}(x) > 0$) і, відповідно, зменшується концентрація електронів.

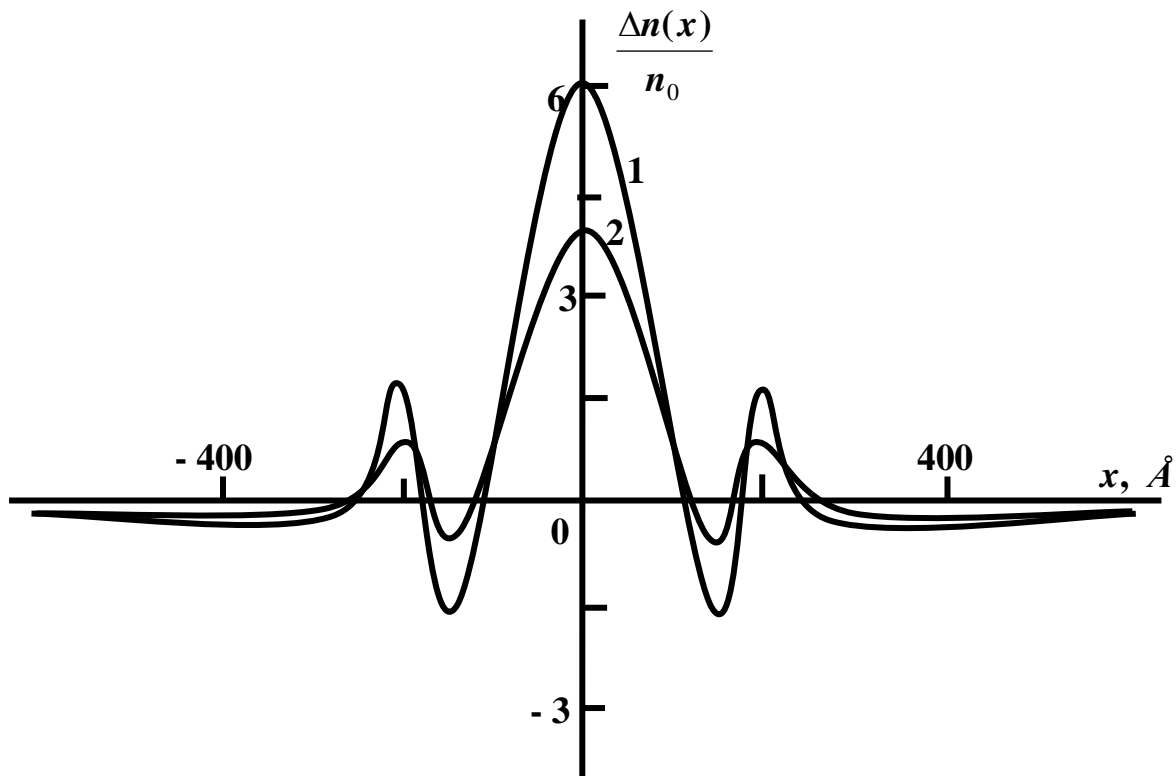


Рис.4.11. Просторовий розподіл електронів в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з точковими дефектами ($\theta_d > 0$) при різних значеннях їх середньої концентрації

$$1 - n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$$

$$\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59; \quad a = 180 \text{ \AA}$$

Причому відносна зміна концентрації носіїв струму $\frac{\Delta n(x)}{n_0}$ під дією електрон-деформаційних ефектів є більш суттєвою для меншої середньої концентрації електронів n_0 (рис. 4.11). Це пояснюється тим, що кристалічна ґратка є більш чутливою до деформації при частковому заповненні електронами зони провідності [145].

Збільшення концентрації міжвузлових атомів ($\theta_d > 0$) від $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$ до $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$ ($N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$) призводить до зменшення амплітуди концентраційного піку електронів на 25% (рис.4.12, криві 1, 2) у центрі внутрішнього шару тришарової гетеросистеми GaAs/InAs/GaAs з дефектно-деформаційними структурами. Але все ж ступінь просторової локалізації носіїв струму в такій квантовій ямі є більшим, ніж у аналогічній бездефектній структурі (рис.4.12, крива 3). Поряд з цим, зростання концентрації дефектів виду центру розтягу в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ призводить до збільшення ступеня локалізації носіїв струму біля гетеромеж такої кристалічної структури.

Такий характер просторового перерозподілу концентрації електронів в тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs можна пояснити впливом самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів на формування потенціального профілю носіїв струму. Зокрема, збільшення середньої концентрації точкових дефектів виду центру розтягу ($\theta_d > 0$) в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ призводить до зменшення (збільшення) деформації розтягу в центрі внутрішнього шару (на межах тришарової гетероструктури) (рис.4.5) і, відповідно до зменшення (збільшення) глибини потенціальної ями. І, навпаки, в околі площин $x = \pm 160$ Å спостерігається збільшення деформації стиску за абсолютною величиною і глибина потенціальної ями для електронів в цій області суттєво зменшується (формується локальний потенціальний бар'єр), що, відповідно, призводить до зменшення концентрації носіїв струму (рис.4.12).

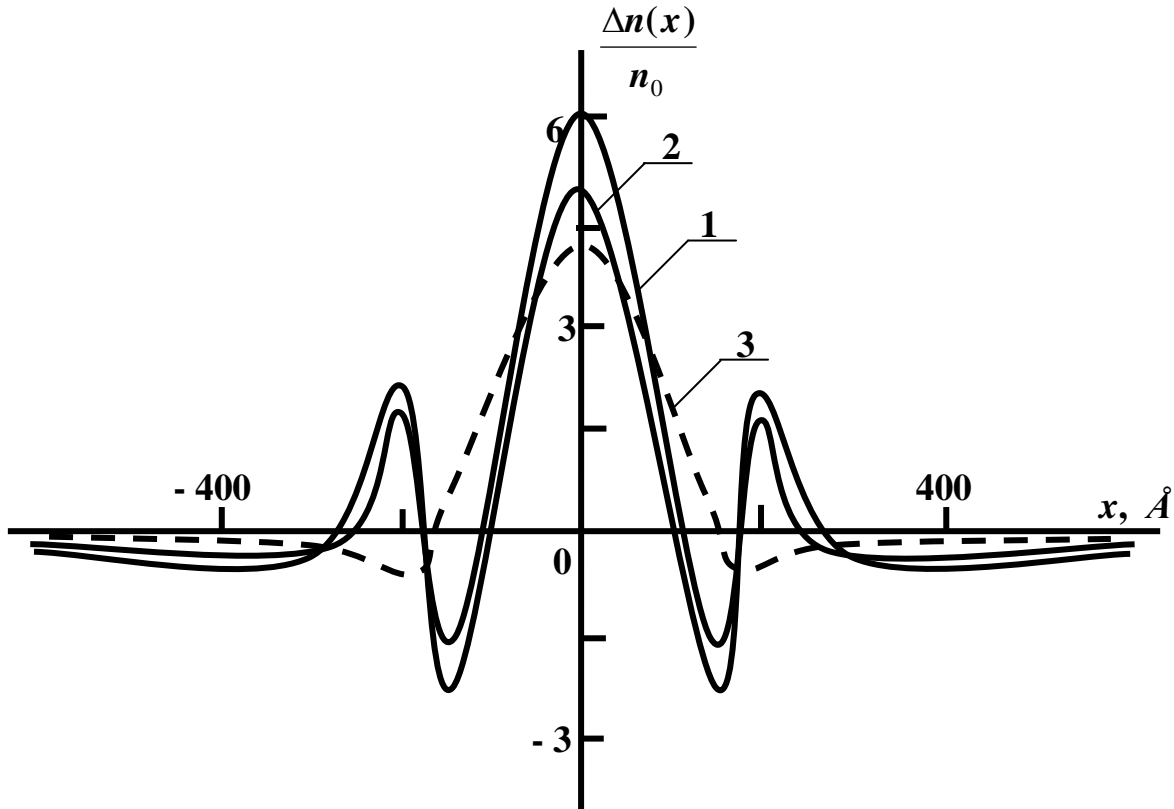


Рис.4.12. Просторовий розподіл електронів в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з точковими дефектами ($\theta_d > 0$) при різних значеннях середньої концентрації дефектів:

$$\mathbf{1} - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59; \quad \mathbf{2} - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79; \quad \mathbf{3} - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0$$

$$n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}; \quad a = 180 \text{ Å}$$

На рис. 4.13 представлено результати теоретичних досліджень відносної зміни концентрації електронів $\frac{\Delta n(x)}{n_0}$ в напруженій тришаровій гетероструктурі GaAs/InGaAs/GaAs з концентрацією дефектів виду центру стиску в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ ($\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$) при різних значеннях середньої концентрації основних носіїв струму n_0 .

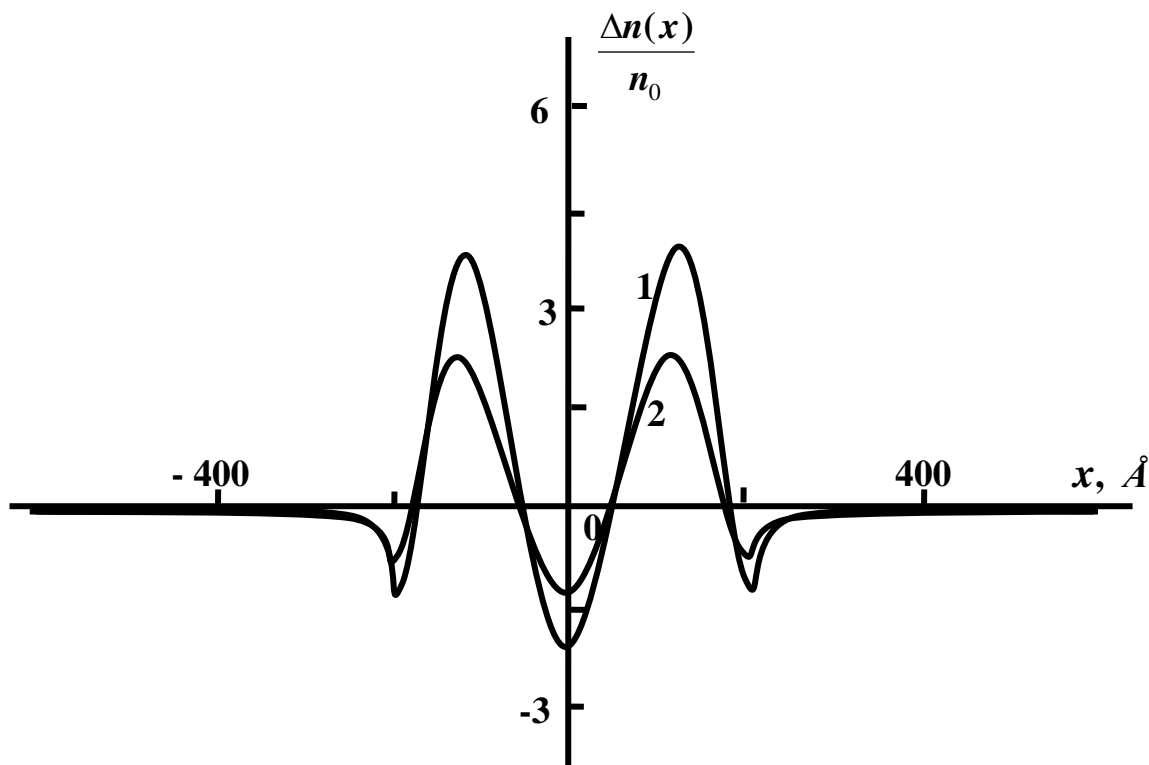


Рис.4.13. Просторовий розподіл електронів в гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з точковими дефектами ($\theta_d < 0$) при різних значеннях їх середньої концентрації:

$$1 - n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$$

$$\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59, \quad a = 180 \text{ Å}$$

В такій кристалічній системі з дефектно-деформаційними структурами відбувається делокалізація носіїв струму в центрі квантової ями за рахунок самоузгоджених електрон-деформаційно-дифузійних ефектів. Однак, в квантовій ямі в околі площин $x = \pm 120 \text{ Å}$ спостерігається два амплітудних піки концентрації електронів провідності, де концентрація основних носіїв струму збільшується приблизно в 3 та 4.8 разів відносно її просторово однорідного значення, яке відповідно становить $n_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ та $n_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Такий характер поведінки локальної зміни концентрації електронів пояснюється зміною потенціального профілю квантової ями

в околі дефектно-деформаційних структур. В центрі внутрішнього шару InAs в результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу вакансій відбувається додатковий стиск матеріалу гетеросистеми (рис.4.8, крива 1), а в околі площин $x = \pm 120 \text{ \AA}$ – відносний розтяг. Це призводить до того, що в центрі квантової ями відбувається зменшення її глибини, а в околі площин $x = \pm 120 \text{ \AA}$ – збільшення на величину $S^{(i)}U^{(i)}(x)$. В результаті цього у напруженому внутрішньому шарі InAs тришарової гетероструктури GaAs/InAs/GaAs формуються дві квантові ями в околі гетеромеж $x \in (-180; -60) \text{ \AA}$ та $x \in (60; 180) \text{ \AA}$, які розділені потенціальним бар'єром.

Аналогічно, як і у випадку присутності міжвузлових атомів, в кристалічних системах з вакансійними дефектно-деформаційними структурами в результаті самоузгодженої електрон-деформаційно-дифузійної взаємодії відносна зміна концентрації носіїв струму $\frac{\Delta n(x)}{n_0}$ є більш суттєвою при зменшенні середньої концентрації електронів n_0 .

При зростанні середньої концентрації точкових дефектів виду центру стиску в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ область локалізації електронів провідності зміщується до центру внутрішнього шару гетероструктури. Це пов'язано з відносним збільшенням параметра деформації розтягу (рис.4.8) і, відповідно, збільшенням глибини квантової ями в околі площини $x = 0$.

4.6. Висновки до розділу 4

1. Побудовано нелінійну модель самоорганізованих дифузійно-деформаційних ефектів з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії в напруженій тришаровій гетероструктурі.
2. Встановлено, що концентраційний профіль точкових дефектів в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ має немонотонний характер з мінімумами поблизу гетеромеж структури GaAs/InAs/GaAs та максимумом в середині внутрішнього шару InAs. Такий характер перерозподілу точкових дефектів зумовлений дією двох конкуруючих факторів: звичайною градієнтною дифузією та деформацією матеріалу гетероструктури.
3. Встановлено, що самоорганізаційні ефекти призводять до появи немонотонної координатної залежності параметра деформації кристалічної ґратки внутрішнього шару поблизу гетеромежі. При значеннях просторово однорідної концентрації дефектів $N_{d0} < N_{dc1}$ немонотонний характер цієї деформації зникає.
4. Встановлено, що в діапазоні концентрацій точкових дефектів $10^{19} < N_{d0} < 10^{20} \text{ см}^{-3}$ деформація ґратки гетероструктури GaAs/InAs/GaAs поблизу гетеромеж визначається неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, а при віддаленні від них – самоузгодженим розподілом дефектів.
5. Показано, що самоузгоджений дифузійно-деформаційний перерозподіл точкових дефектів виду центру розтягу призводить до зменшення їх середньої концентрації у внутрішньому стиснутому шарі InAs гетероструктури GaAs/InAs/GaAs на 15% при ширині

цього шару $a = 180 \text{ \AA}$ і $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.59$ та на 47% при $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.79$

порівняно з просторово-однорідним розподілом.

6. Побудована теорія утворення $n-n^+$ переходів у гетероструктурах із самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами. Встановлено, що збільшення концентрації міжвузлових атомів ($\theta_d > 0$) в діапазоні $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ призводить до зменшення амплітуди концентраційного піку електронів у внутрішньому шарі тришарової гетеросистеми GaAs/InAs/GaAs з дефектно-деформаційними структурами, що пояснюється зменшенням величини параметра деформації розтягу в цій області.
7. У тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з вакансіями із середньою концентрацією з діапазону $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$ спостерігається зменшення носіїв струму в центрі квантової ями та зростання концентрації електронів поблизу гетеромеж порівняно з бездефектною структурою. Такий характер поведінки локальної зміни концентрації електронів провідності пояснюється зміною потенціального профілю квантової ями в результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу вакансій, який призводить до додаткового стиску матеріалу в центрі внутрішнього шару гетеросистеми та розтягу в околі площини $x = \pm 120 \text{ \AA}$.

РОЗДІЛ 5. Роль акустoeлектронної взаємодії у формуванні поверхневої надгратки адатомів

5.1. Вступ

Останнім часом предметом інтенсивних досліджень є отримання напівпровідникових структур із самоорганізованими нанокластерами методами молекулярно-променевої епітаксії [150, 151] та іонної імплантації [152, 153], а також можливість керування їх фізичними властивостями. Для оптимізації технологічного процесу та прогнозованого керування фізичними параметрами напівпровідникових структур з нанокластерами важливою є інформація про нуклеацію (початкову стадію формування) періодичних наноструктур адсорбованих атомів (адатомів) та імплантованих домішок.

У роботі [154] розвинуто нелінійну дифузійно-деформаційну теорію самоорганізації нанокластерів імплантованих домішок в об'ємі напівпровідника, яка враховує пружну взаємодію імплантованих домішок між собою та з атомами матриці. Домішка, яка потрапляє у матрицю, призводить до зміни її об'єму та енергії, а початкова флуктуація деформації за певних умов зумовлює виникнення деформаційно-індукованих потоків імплантованих домішок. У результаті в неоднорідному деформаційно-концентраційному полі з'являються сили, пропорційні градієнтам концентрації та деформації, які додатково деформують матрицю. Ці сили спричиняють наростання початкової флуктуації та призводять до самоорганізації кластерів домішок.

У роботі [61] розвинуто теорію спонтанної нуклеації поверхневої нанометрової ґратки, яка обумовлена нестійкістю у системі адатомів, що взаємодіють із самоузгодженою поверхневою акустичною хвилею (ПАХ). У межах даної теорії встановлено умови формування

нанокластерів на поверхні твердих тіл та визначено періоди нанометрової ґратки як функції концентрації адатомів і температури.

У напівпровідникових структурах у процесах самоорганізації дефектів важливим є питання: чи адатоми є нейтральними, чи іонізованими донорами (акцепторами)? У другому випадку до уваги слід брати і взаємодію адатомів з внутрішнім електричним полем, яке виникає за рахунок їх періодичного просторово-неоднорідного перерозподілу. Окрім цього, періодична деформація, яка виникає на поверхні напівпровідника призводить до модуляції дна зони провідності і, відповідно, до модуляції електронної густини. Неоднорідне електричне поле, яке виникає, призводить до неоднорідного зміщення вузлів кристалічної ґратки і, відповідно, до зміни амплітуди ПАХ. У даному розділі досліджено вплив взаємодії ПАХ з електронною підсистемою на умови формування періодичних нанометрових структур адатомів та їх періоди.

5.2. Деформація на поверхні напівпровідника з врахуванням акустoeлектронної взаємодії

Рівняння для вектора зміщення \vec{u} пружного середовища має вигляд [16]:

$$\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = c_t^2 \Delta \vec{u} + (c_l^2 - c_t^2) \text{grad}(\text{div } \vec{u}), \quad (5.1)$$

де c_l , c_t – поздовжня і поперечна швидкості звуку, відповідно.

Нехай поверхня напівпровідника співпадає з площиною $z = 0$ (вісь z напрямлена в глибину кристалу) і, припустимо, що вздовж осі x виникає поверхневе збурення пружного середовища, яке задамо у вигляді статичної ПАХ, яка швидко затухає в глибину напівпровідника та має наростаючу з часом амплітуду:

$$u_x = -iqR e^{iqx + \lambda t - k_l z} - ik_t Q e^{iqx + \lambda t - k_t z}, \quad (5.2)$$

$$u_z = k_l R e^{iqx + \lambda t - k_l z} + qQ e^{iqx + \lambda t - k_t z}, \quad (5.3)$$

де $k_{l,t}^2 = q^2 + \frac{\lambda^2}{c_{l,t}^2}$; λ – інкремент дефектно-деформаційної нестійкості, R ,

Q – амплітуди ПАХ.

Тоді деформація ε на поверхні напівпровідника ($z = 0$):

$$\varepsilon = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{\lambda^2}{c_l^2} R e^{iqx + \lambda t}. \quad (5.4)$$

Розглянемо два випадки: 1) легований напівпровідник n -типу, який містить домішки – іонізовані донори, вільні електрони та адатоми, які також є іонізованими донорами; 2) легований напівпровідник p -типу, який містить домішки – іонізовані донори, вільні електрони та нейтральні адатоми. Для цих випадків повинні відповідно виконуватись умови електронейтральності:

$$n_0 = N_d^+ + N_0, \quad (5.5)$$

$$n_0 = N_d^+, \quad (5.6)$$

де N_d^+ , n_0 , N_0 – поверхнева концентрація іонізованих донорів, просторово-однорідні значення поверхневої концентрації електронів та адатомів, відповідно.

Періодична поверхнева деформація призводить до просторово-неоднорідного перерозподілу адатомів $N(x)$, модуляції дна зони провідності і, відповідно, перерозподілу концентрації електронів провідності $n(x)$ та електростатичного потенціалу $\varphi(x)$:

$$N(x) = N_0 + N_1(x) = N_0 + N_1(q) e^{iqx + \lambda t}, \quad (5.7)$$

$$n(x) = n_0 + n_1(x) = n_0 + n_1(q) e^{iqx + \lambda t}, \quad (5.8)$$

$$\varphi(x) = \varphi(q) e^{iqx + \lambda t}, \quad (5.9)$$

де $N_1(q)$, $n_1(q)$, $\varphi(q)$ – амплітуди відповідних періодичних збурень.

У результаті просторового перерозподілу електричного заряду на поверхні напівпровідника вздовж осі x виникає неоднорідне електричне поле $E(x)$, яке призводить до неоднорідного зміщення вузлів кристалічної ґратки і, відповідно, до виникнення додаткової механічної напруги σ_{xx}^{el} :

$$\sigma_{xx}^{el} = \frac{e}{a} \frac{\partial E(x)}{\partial x} = -\frac{e}{a} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2}, \quad (5.10)$$

де a – параметр кристалічної ґратки.

Тоді компоненти тензора деформації, обумовленої акустoeлектронною взаємодією, мають вигляд:

$$\varepsilon_{xx}^{el} = -\frac{e}{aE} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2}; \quad \varepsilon_{zz}^{el} = \frac{\nu e}{aE} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2}, \quad (5.11)$$

де E , ν – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона, відповідно.

Запишемо рівняння Пуассона, яке з врахуванням (5.5) – (5.9) набуде вигляду для випадку заряджених адатомів:

$$-q^2 \varphi(q) = \frac{e}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a} (n_1(q) - N_1(q)) \quad (5.12, a)$$

та нейтральних адатомів:

$$-q^2 \varphi(q) = \frac{e}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a} n_1(q), \quad (5.12, b)$$

де ε_0 , $\tilde{\varepsilon}$ – діелектрична стала та діелектрична проникність середовища.

Тоді деформація на поверхні напівпровідника, яка обумовлена акустoeлектронною взаємодією, відповідно:

$$\varepsilon^{el} = \varepsilon_{xx}^{el} + \varepsilon_{zz}^{el} = -\frac{e^2(1-\nu)}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a^2 E} (n_1(q) - N_1(q)) e^{iqx + \lambda t}, \quad (5.13, a)$$

$$\varepsilon^{el} = -\frac{e^2(1-\nu)}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a^2 E} n_1(q) e^{iqx + \lambda t}. \quad (5.13, b)$$

Як бачимо з формул (5.13), електрон-деформаційна взаємодія призводить до додаткового стиску кристалічної ґратки в областях накопичення електронів і, навпаки, до додаткового розтягу в областях з концентрацією електронів, меншою за середнє значення.

5.3. Формування періодичної структури заряджених адатомів

Рівняння для концентрації заряджених адатомів з врахуванням акустoeлектронної взаємодії має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_d N \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \\ - D_d \frac{\theta_d}{kT} \frac{\partial}{\partial x} \left(N \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon + \varepsilon^{el} + l_d^2 \frac{\partial^2 (\varepsilon + \varepsilon^{el})}{\partial x^2} \right) \right), \end{aligned} \quad (5.14)$$

де D_d та μ_d – поверхневий коефіцієнт дифузії та рухливість адатомів, які пов’язані між собою співвідношенням Ейнштейна $\mu_d = D_d \frac{e}{k_B T}$ (k_B – стала Больцмана, T – температура); θ_d – деформаційний потенціал; l_d – характерна довжина взаємодія адатомів з атомами ґратки. Другий доданок враховує взаємодію адатомів з електричним полем, яке виникає за рахунок просторово-неоднорідного перерозподілу електричного заряду, третій доданок виражає взаємодію адатомів з деформаційним полем з врахуванням нелокальної взаємодії.

З врахуванням (5.4), (5.7) – (5.9), (5.13) та у наближенні $N_1 \ll N_0$, рівняння (5.14) запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} \lambda N_1(q) = -D_d q^2 N_1(q) + \frac{D_d N_0 \Phi}{kT} (n_1(q) - N_1(q)) - \\ - \frac{D_d N_0 \theta_d}{kT} \left(\frac{\lambda^2}{c_l^2} R q^2 (1 - q^2 l_d^2) \right) + \frac{\Phi q^2 (1 - q^2 l_d^2)}{2 \alpha \rho c_l^2 \beta (3 - 4\beta)} (n_1(q) - N_1(q)), \end{aligned} \quad (5.15)$$

де $\Phi = \frac{e^2}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a}$; ρ – густина середовища; $\beta = \frac{c_t^2}{c_l^2}$.

Густина електронного струму:

$$j = n \mu_n \frac{d\chi}{dx}, \quad (5.16)$$

де μ_n – рухливість електронів; χ – електрохімічний потенціал, який визначається зі співвідношення

$$\chi(x) = k_B T \ln \frac{n(x)}{N_i} - e\varphi(x) + a_c (\varepsilon(x) + \varepsilon^{el}(x)), \quad (5.17)$$

де $N_i = 2 \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2}$ – ефективна густина станів; a_c – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності.

Тоді рівняння неперервності з врахуванням (5.16), (5.17) можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} e \frac{\partial n}{\partial t} = & k_B T \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{n}{N_i} \right) - e \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \\ & + a_c \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon + \varepsilon^{el}) \right). \end{aligned} \quad (5.18)$$

З врахуванням (5.4), (5.7)-(5.9) та (5.13) рівняння (5.18) запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} n_1(q) (e\lambda + k_B T \mu_n q^2 + n_0 \mu_n \Phi(1 + q^2 r^2)) = \\ = N_1(q) n_0 \mu_n \Phi(1 + q^2 r^2) + a_c n_0 \mu_n q^2 \frac{\lambda^2}{c_l^2} R, \end{aligned} \quad (5.19)$$

де $r^2 = -\frac{a_c}{2a\mu c_l^2 \beta(3-4\beta)}$. Тут враховано, що $a_c < 0$.

Розв'язавши систему рівнянь (5.15) та (5.19), отримаємо вирази для амплітуд поверхневої концентрації адатомів $N_1(q)$ та електронів провідності $n_1(q)$.

Просторово-неоднорідний розподіл адатомів модулює поверхневу енергію $F(x)$, що призводить до виникнення латеральної механічної напруги $\sigma_{xz} = \frac{\partial F(N(x))}{\partial x}$, яка компенсується напругою зсуву у середовищі. Гранична умова, що виражає баланс латеральних напружень має вигляд:

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right)_{z=0} = \frac{\partial F(N(x))}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial N} \frac{\partial N_1(x)}{\partial x}. \quad (5.20)$$

Окрім цього, у результаті взаємодії адатомів з атомами напівпровідника на поверхні виникає нормальна механічна напруга і відповідна гранична умова має вигляд:

$$\frac{E}{1+\nu} \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + \varepsilon_{zz}^{el} + \frac{\nu}{1-2\nu} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \varepsilon_{xx}^{el} \right) \right) \bigg|_{z=0} = \frac{\theta_d}{a} N_1(x). \quad (5.21)$$

Таким чином, отримано систему лінійних однорідних рівнянь (5.20), (5.21) відносно амплітуд R та Q і з умови нетривіальності розв'язків (з умови рівності нулю детермінанта цієї системи) можна отримати дисперсійні залежності $\lambda(q)$.

Розрахунки $\lambda(q)$ проводилися для напівпровідника GaAs при наступних значеннях параметрів: $l_d = 2,9$ нм; $a = 0,565$ нм; $c_l = 4400$ м/с; $c_t = 2475$ м/с; $\rho = 5320$ кг/м³; $a_c = -7,17$ еВ; $T = 300$ К; $D_d = 5 \cdot 10^{-9}$ см²/с; $\theta_d = 10$ еВ; $\tilde{\varepsilon} = 12$; $\mu_n = 8 \cdot 10^3$ см²/В·с.

На рис. 5.1 приведено результати розрахунку залежності інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від модуля хвильового вектора при різних значеннях концентрації іонізованих донорів N_d та різних значеннях середньої концентрації адатомів. Така залежність має максимум, який при збільшенні концентрації іонізованих донорів (вільних електронів) зсувається в бік більших значень модуля хвильового вектора. Значення q_{\max} , при якому інкремент дефектно-деформаційної нестійкості має максимум, визначає період домінуючої структури $d = \frac{2\pi}{q_{\max}}$ (рис. 5.2). При збільшенні концентрації іонізованих

донорів акустoeлектронні ефекти призводять до збільшення величини інкремента дефектно-деформаційної нестійкості. Таким чином, у напівпровіднику з більшим ступенем легування донорними домішками процеси формування нанометрових періодичних структур повинні відбуватися швидше. Роль акустoeлектронних ефектів у формуванні періодичної ґратки адатомів є суттєвішою при менших концентраціях

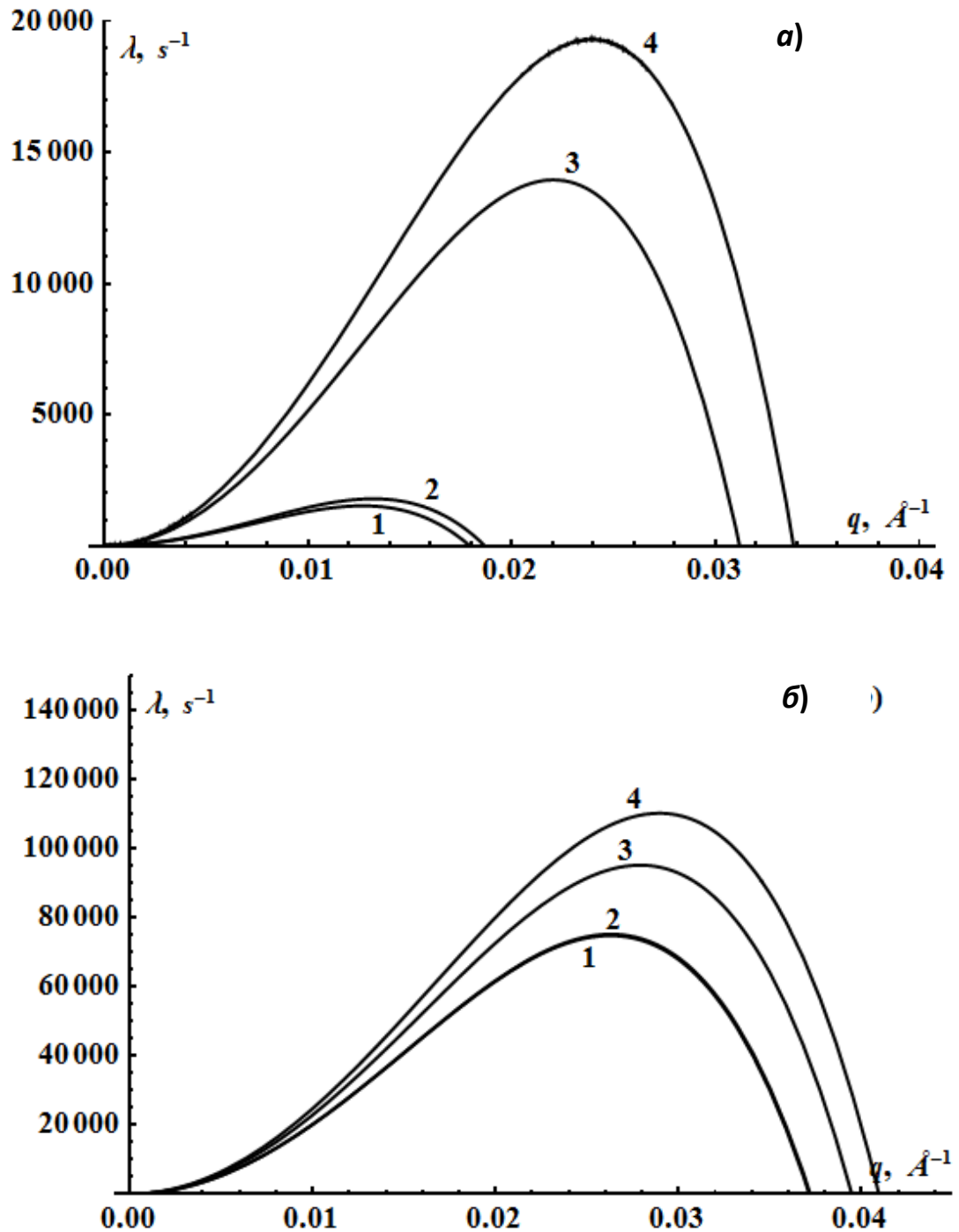


Рис. 5.1. Залежність інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від хвильового вектора при різних значеннях концентрації іонізованих донорів:

1 – $N_d = 10^9 \text{ cm}^{-2}$; 2 – $N_d = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; 3 – $N_d = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$; 4 – $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-2}$

а) $N_0 = 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; б) $N_0 = 8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

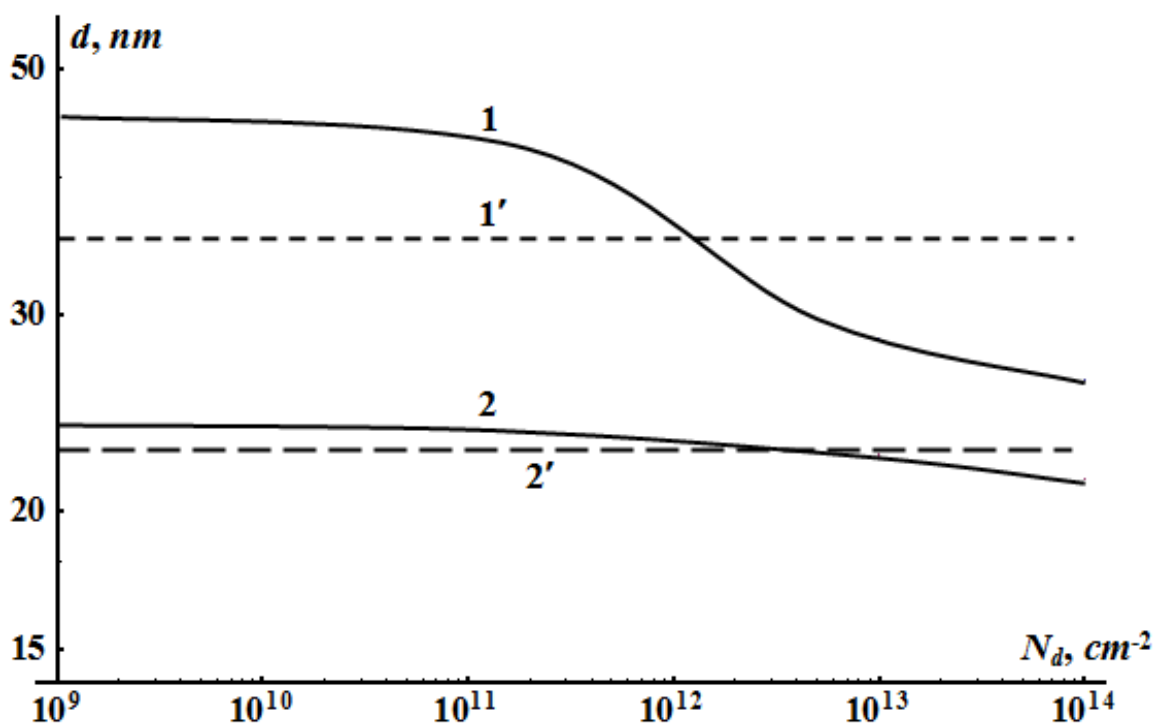


Рис. 5.2. Залежність періоду поверхневої дефектно-деформаційної структури від концентрації іонізованих донорів при різних значеннях середньої концентрації адатомів:

- 1, 1' – при концентрації адатомів $N_0 = 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ з врахуванням та без врахування електрон-деформаційної взаємодії;
- 2, 2' – при концентрації дефектів $N_0 = 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ з врахуванням та без врахування електрон-деформаційної взаємодії

адсорбованих атомів (рис. 5.1, а, б). Зокрема, для середньої концентрації адатомів $N_0 = 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при збільшенні концентрації донорів від 10^9 см^{-2} до 10^{14} см^{-2} інкремент дефектно-деформаційної нестійкості зростає приблизно у 13 разів (рис. 5.1, а), тоді як при концентрації адатомів $N_0 = 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ – тільки в 1,5 разів (рис. 5.1, б).

Така ж закономірність спостерігається і для періоду домінуючої дефектно-деформаційної ґратки (рис. 5.2). Для середньої концентрації

адатомів $N_0 = 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при збільшенні концентрації донорів від 10^9 см^{-2} до 10^{14} см^{-2} період дефектно-деформаційної структури монотонно зменшується від 45 нм до 25 нм, а при концентрації адатомів $N_0 = 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ – від 23 нм до 21 нм. Причому, приблизно, при концентрації донорів меншій, ніж середня концентрація адатомів, електрон-деформаційні ефекти призводять до збільшення періоду ґратки адатомів, а при більшій концентрації донорів – до зменшення. Це пояснюється тим, що при малій концентрації донорів амплітуда просторового збурення адатомів є більшою, ніж відповідна амплітуда для електронів провідності ($N_1(q) > n_1(q)$) і електронна складова деформації ε^{el} (формула (5.13, а)) визначається в основному концентрацією позитивно заряджених адатомів. У цьому випадку знак електронної складової деформації у кожній точці поверхні співпадає зі знаком механічної деформації, яка виникає за рахунок наявності адатомів (рис. 5.3, криві 1 – 4). При концентрації донорів більшій, ніж середня концентрація адатомів, характер електронної складової деформації визначається просторовим розподілом електронів провідності. У цьому випадку $n_1(q) > N_1(q)$ і електронна складова деформації має характер протилежний до механічної деформації, яка виникає за рахунок наявності адатомів (рис. 5.3, крива 5).

Формування самоорганізованих періодичних дефектно-деформаційних структур можливе лише при перевищенні концентрацією адатомів деякого критичного значення N_c . На рис. 5.4 представлено залежність критичної концентрації адатомів від ступеня легування напівпровідника донорними домішками при різних значеннях температури. Отримані результати показують, що збільшення концентрації іонізованих донорів (концентрації електронів провідності) призводить до зменшення критичної концентрації адатомів, при яких можливе формування нанометрової ґратки адатомів. Зокрема, для температури $T = 100 \text{ K}$, при зміні концентрації іонізованих донорів у діапазоні від 10^9 см^{-2} до 10^{14} см^{-2} , критичне значення N_c зменшується від $2,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ до $1,35 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, а при температурі $T = 300 \text{ K}$ – від $7,8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ до $3,91 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

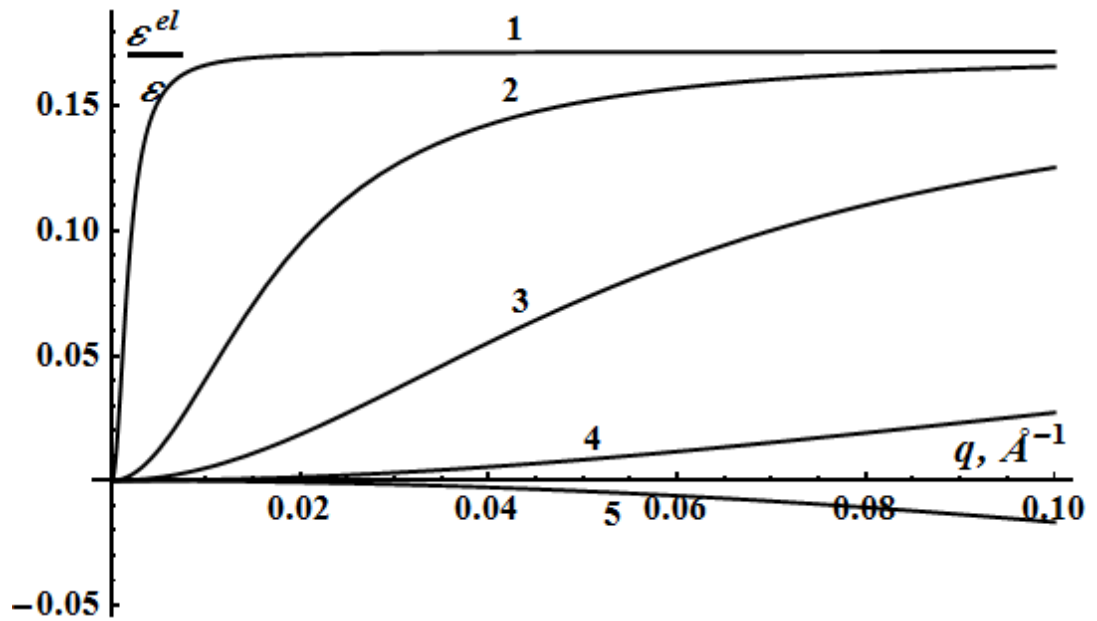


Рис. 5.3. Залежність частки електронної складової деформації від модуля хвильового вектора при різних значеннях концентрації іонізованих донорів:

1 – $N_d = 10^8 \text{ cm}^{-2}$; 2 – $N_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$; 3 – $N_d = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$;
4 – $N_d = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 5 – $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-2}$

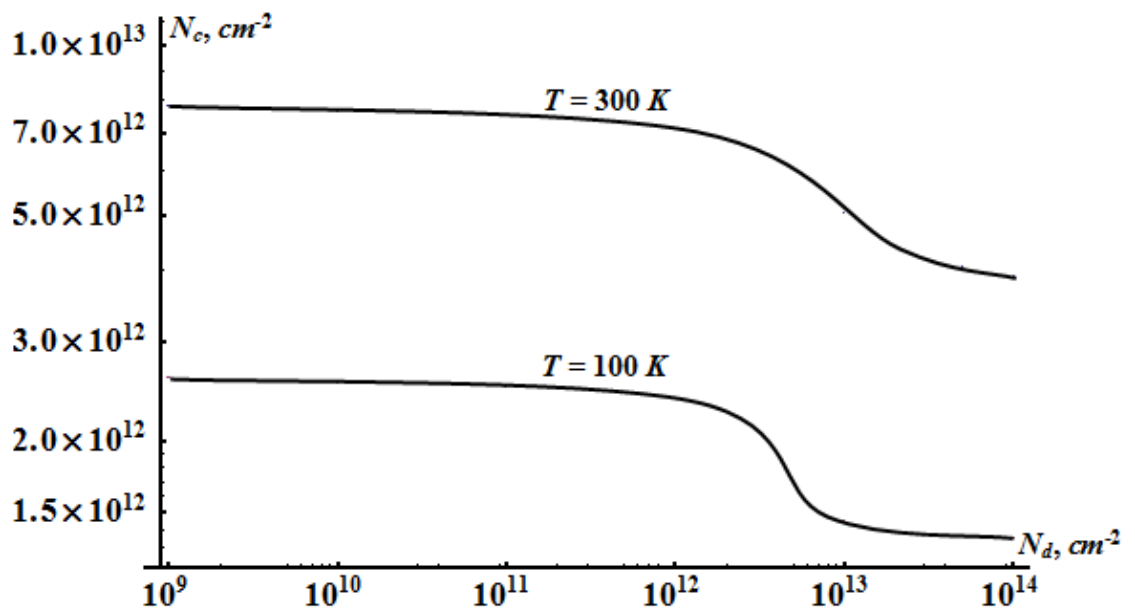


Рис. 5.4. Залежність критичного значення концентрації адсорбованих атомів від концентрації іонізованих донорів

З рис. 5.4 бачимо, що процеси самоорганізації адатомів краще відбуваються при менших температурах. Це співпадає з результатами, отриманими в роботі [155], де показано, що формування дефектно-деформаційної ґратки можливе лише при температурі, яка менша за деяке критичне значення. Збільшення ступеня легування напівпровідника донорними домішками дозволяє збільшити критичну температуру, при якій можливі процеси самоорганізації наноструктур.

5.4. Формування періодичної структури нейтральних адатомів

У випадку формування періодичної структури нейтральних адатомів рівняння (5.15) та (5.19) з врахуванням (5.13, б) можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} (\lambda + D_d q^2) N_1(q) = \\ = - \frac{D_d N_0 \theta_d q^2 (1 - q^2 l_d^2)}{kT} \left(\frac{\lambda^2}{c_l^2} R + \frac{\Phi}{2a\rho c_l^2 \beta (3 - 4\beta)} n_1(q) \right), \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$n_1(q) (e\lambda + k_B T \mu_n q^2 + n_0 \mu_n \Phi (1 + q^2 r^2)) = a_c n_0 \mu_n q^2 \frac{\lambda^2}{c_l^2} R. \quad (5.23)$$

У граничному випадку при $n_0 \rightarrow 0$ рівняння (5.22) співпадає з відповідним рівнянням у роботі [6]. При збільшенні поверхневої концентрації вільних електронів амплітуда $n_1(q)$ монотонно зростає, асимптотично наближаючись до значення

$$\lim_{n_0 \rightarrow \infty} n_1(q) = \frac{a_c q^2 \frac{\lambda^2}{c_l^2} R}{\Phi (1 + q^2 r^2)} \approx \frac{a_c q^2}{\Phi} \frac{\lambda^2}{c_l^2} R.$$

Тоді відношення електронної складової деформації до механічної деформації, що виникає за рахунок просторового перерозподілу

адатомів на поверхні напівпровідника не залежить від концентрації електронів і визначається виразом

$$\frac{\varepsilon^{el}}{\varepsilon} = \frac{(1-\nu)a_c q^2}{aE} = \frac{a_c q^2}{2a\rho c_l^2 \beta(3-4\beta)}. \quad (5.24)$$

Тобто вклад електронної складової деформації зростає зі збільшенням модуля хвильового вектора за параболічним законом і не може перевищувати 2% (при $q = 1 \text{ нм}^{-1}$) від механічної деформації, що виникає за рахунок просторового перерозподілу адатомів. При меншій поверхневій концентрації це значення є ще меншим. Таким чином, можна зробити висновок, що у випадку неіонізованих адатомів роль електрон-деформаційних ефектів є незначною.

У запропонованій моделі не береться до уваги поверхнева модуляція донорів. Таке наближення є справедливим у тому випадку, коли деформаційний потенціал легуючих домішок є незначним порівняно з деформаційним потенціалом адсорбованих атомів. Наприклад, якщо іонний радіус легуючої домішки несуттєво відрізняється від відповідного значення для заміщеного атома напівпровідникової матриці.

5.5. Висновки до розділу 5

1. Досліджено роль акустoeлектронних ефектів у нуклеації нанорозмірних структур адатомів, що відбувається в результаті самоузгодженої взаємодії адатомів з поверхневою акустичною хвилею та електронною підсистемою у випадку заряджених та незаряджених адсорбованих атомів.
2. Встановлено, що у випадку заряджених адатомів у напівпровіднику GaAs збільшення концентрації легуючої донорної домішки

призводить до зменшення критичної концентрації адсорбованих атомів, при якій можливе формування самоорганізованої наноструктури.

3. Встановлено, що у випадку заряджених адатомів у напівпровіднику GaAs збільшення концентрації легуючої донорної домішки призводить до зменшення періоду самоорганізованих поверхневих наноструктур адатомів.
4. Показано, що акустoeлектронна взаємодія призводить до зміни неоднорідної деформації, що виникає за рахунок просторового перерозподілу адатомів. Встановлено, що залежно від ступеня легування напівпровідника донорною домішкою деформація може змінюватись до 17% у випадку іонізованих адатомів і тільки до 2% у випадку незаряджених адатомів.

РОЗДІЛ 6. Вплив всебічного тиску на формування поверхневої надгратки адатомів

6.1. Вступ

На умови формування самоорганізованих нанокластерів суттєво впливають деформаційні ефекти, обумовлені ненульовим об'ємом власних дефектів та домішок [24], акустoeлектронною взаємодією [20, 22], невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів [26], а також зовнішніми чинниками, наприклад, впливом електричного [27], магнітного поля [29] чи ультразвукової хвилі [30-33].

У гетероепітаксійних системах з незначною невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів режим росту нанокластерів визначається тільки співвідношенням енергій двох поверхонь і енергії межі розділу. Якщо сума поверхневої енергії нарощуваного шару і енергії межі розділу менша від енергії поверхні підкладки, тобто якщо нарощуваний матеріал змочує підкладку, то виникає режим росту Франка-ван дер Мерве [34]. У гетероепітаксійних системах за наявності значної невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів ($> 4\%$) процес формування нанокластерів здійснюється у два етапи відповідно до методу Странського-Крастанова [34]. На першому етапі відбувається ріст псевдоморфного напруженого шару (наприклад, InAs на підкладці GaAs). При досягненні ним критичної товщини (1.5-1.7 моношару (МШ)) настає другий етап – спонтанний розпад псевдоморфного шару на систему кристалічних островців і змочуючий шар товщиною ~ 1 МШ. Такий розпад зумовлений релаксацією пружних напружень, що виникають у гетероепітаксійній системі за

неузгодження параметрів ґраток $\left(f = \frac{a^{\text{InAs}} - a^{\text{GaAs}}}{a^{\text{InAs}}} \approx 7\% \right)$, і різними коефіцієнтами термічного розширення підкладки GaAs та епітаксійного шару InAs.

Тому, очевидно, що дія зовнішніх пружних полів впливатиме на умови формування нанокластерів [35-37]. Зокрема, в роботі [35] представлено результати експериментальних досліджень зовнішнього впливу механічної деформації на умови формування квантових точок. У цій роботі було експериментально встановлено, що за допомогою зовнішнього тиску можна керувати розмірами та густиною квантових точок.

У даній роботі розроблено модель нуклеації нанометрової структури адатомів при дії всебічного тиску та в межах запропонованої моделі проаналізовано можливість розширення температурного діапазону, в якому формуються нанокластери.

6.2. Модель впливу всебічного тиску на формування надгратки адатомів під дією лазерного опромінення

У роботі [35] представлено результати експериментальних досліджень зовнішнього впливу механічної деформації на умови формування квантових точок. У цій роботі тиск створювався за допомогою установки представленої на рис. 6.1. і було експериментально встановлено, що за допомогою зовнішнього тиску можна керувати розмірами та густиною квантових точок.

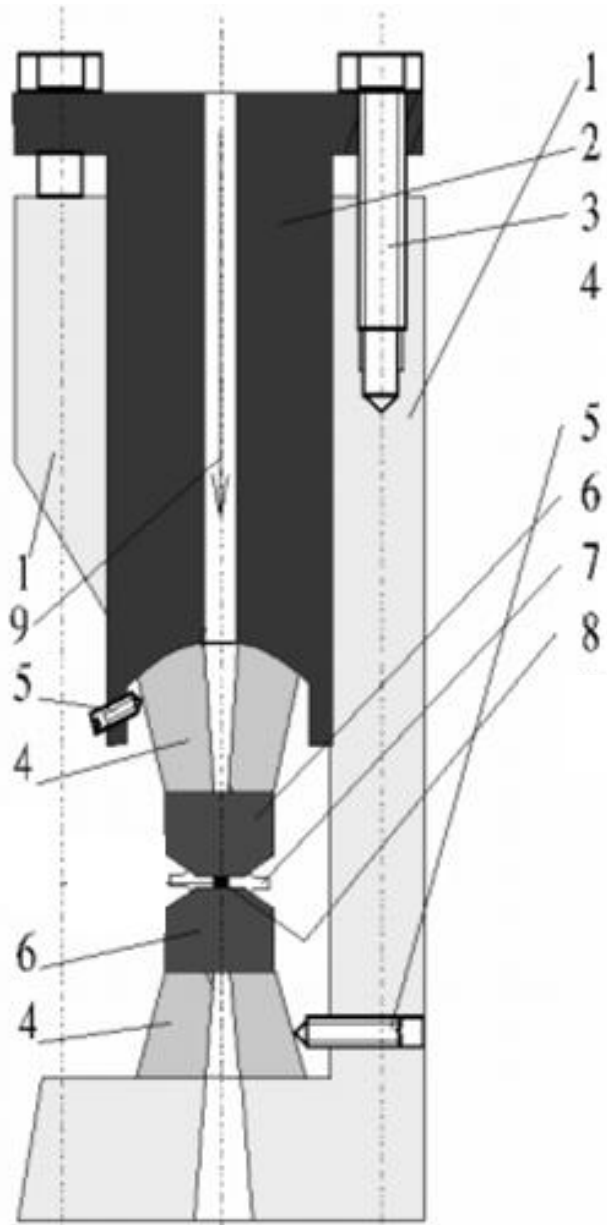


Рис. 6.1. Камера високого тиску з міні-наковальнями з лейкосапфіра:

1 – корпус; 2 – поршень; 3 – гвинти для створення навантаження; 4 – твердосплавні опори; 5 – гвинти для юстування; 6 – наковальні;
7 – прокладка; 8 – зразок; 9 – лазерний промінь

Нехай напівпровідник піддається лазерному опроміненню (рис. 6.2, а). При цьому у приповерхневому шарі генеруються дефекти (міжвузлові атоми та вакансії) із середньою концентрацією N_0 . Якщо середня поверхнева концентрація $N_0 < N_c$, то в результаті дифузії

дефекти розподіляються по поверхні рівномірно. Якщо середня поверхнева концентрація $N_0 > N_c$, то виникає поверхнєве збурення пружного середовища і на поверхні виникає надгратка адатомів.

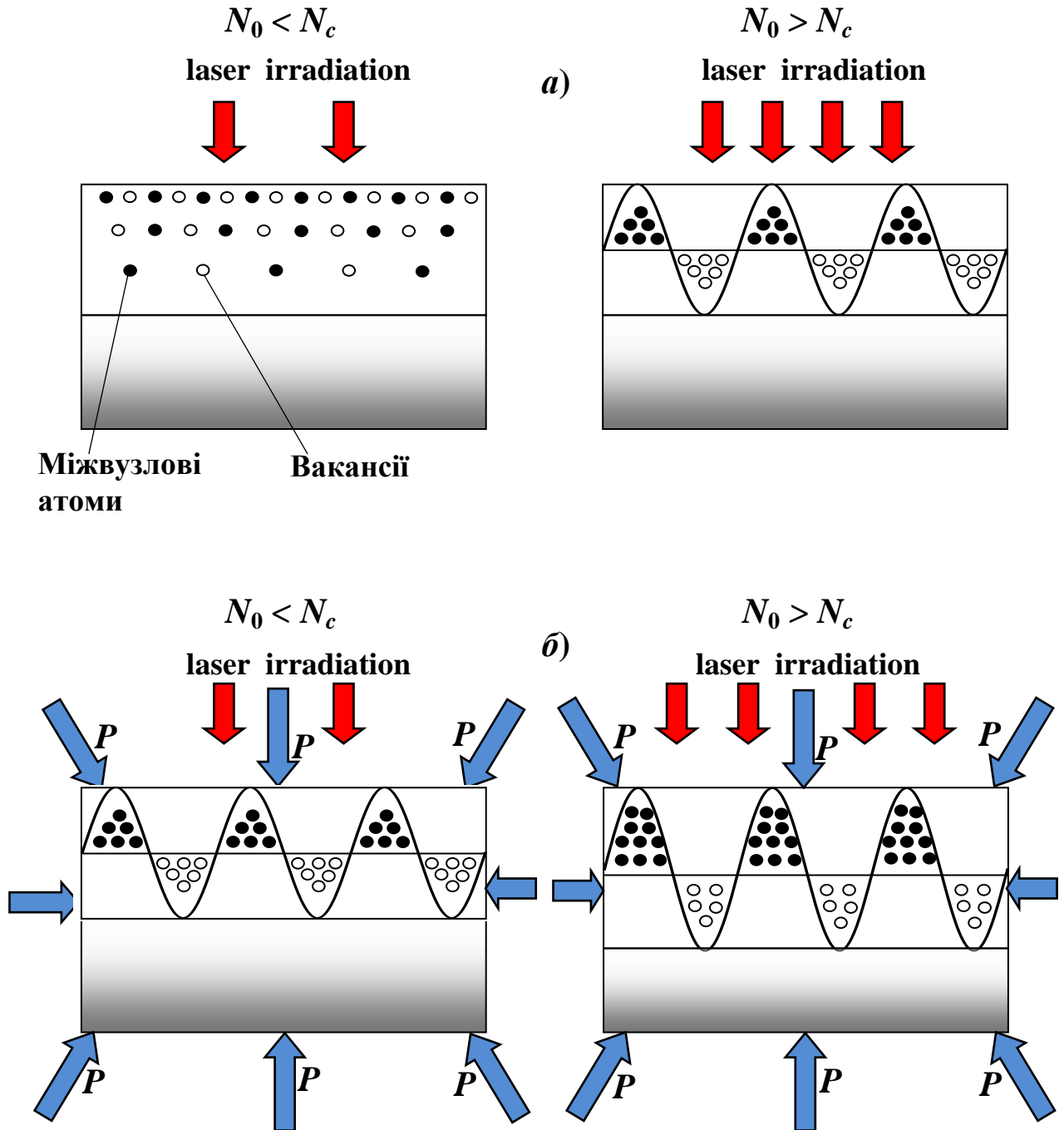


Рис. 6.6. Геометрична модель приповерхневого шару напівпровідника, що піддається лазерному опроміненню

а) без впливу зовнішнього тиску; б) при дії всебічного тиску

Зовнішній тиск змінює умови формування надгратки (рис. 2, б): навіть якщо середня поверхнева концентрація $N_0 < N_c$, під дією тиску при певних його значеннях на поверхні може формуватися надгратка, а при $N_0 > N_c$ збільшується амплітуда статичної хвилі.

Розглянемо два випадки: 1) нелегований напівпровідник, в якому роль акустoeлектронних ефектів є незначною; 2) легований напівпровідник n -типу із значною акустoeлектронною взаємодією.

6.3. Формування нанометрової структури адатомів у нелегованому напівпровіднику при дії всебічного тиску

Рівняння для вектора зміщення \vec{u} пружного середовища має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = c_t^2 \Delta \mathbf{u} + (c_l^2 - c_t^2) \text{grad}(\text{div } \mathbf{u}). \quad (6.1)$$

Нехай поверхня напівпровідника співпадає з площиною $z = 0$ (вісь z напрямлена в глибину кристалу). Припустимо, що вздовж осі x виникає поверхневе збурення пружного середовища, яке задамо у вигляді статичної ПАХ, що швидко затухає вглибину напівпровідника та має наростаючу з часом амплітуду:

$$u_x = -iqR e^{iqx + \lambda t - k_l z} - ik_t Q e^{iqx + \lambda t - k_l z}, \quad (6.2)$$

$$u_z = k_l R e^{iqx + \lambda t - k_l z} + qQ e^{iqx + \lambda t - k_l z}, \quad (6.3)$$

де $k_{l,t}^2 = q^2 + \lambda^2 / c_{l,t}^2$; λ – інкремент дефектно-деформаційної нестійкості; R, Q – амплітуди ПАХ.

Тоді деформація ε на поверхні напівпровідника ($z = 0$):

$$\varepsilon = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{\lambda^2}{c_l^2} R e^{iqx + \lambda t}. \quad (6.4)$$

Періодична поверхнева деформація призводить до просторово-

неоднорідного перерозподілу адатомів $N(x)$:

$$N(x) = N_0 + N_1(x, q) = N_0 + N_1(q)e^{iqx + \lambda t}, \quad (6.5)$$

де N_0 , $N_1(q)$ – просторово-однорідне значення поверхневої концентрації адатомів та амплітуда їх періодичного збурення, відповідно.

Рівняння для концентрації адатомів має вигляд:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{D_d \theta_d}{kT} \frac{\partial}{\partial x} \left(N \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon + l_d^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^2} \right) \right), \quad (6.6)$$

де D_d – поверхневий коефіцієнт дифузії адатомів; k – стала Больцмана; T – температура; θ_d – деформаційний потенціал; l_d – характерна довжина взаємодії адатомів з атомами ґратки. Другий доданок виражає взаємодію адатомів з деформаційним полем з врахуванням нелокальної взаємодії.

Гранична умова, що виражає баланс латеральних напружень, має вигляд:

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right)_{z=0} = 0, \quad (6.7)$$

де E , ν – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона, відповідно.

Окрім цього, у результаті взаємодії адатомів з атомами напівпровідника на поверхні виникає нормальна механічна напруга; відповідна гранична умова з врахуванням гідростатичного тиску P_0 , що діє на напівпровідник, має вигляд:

$$\frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\varepsilon_{zz} + \frac{\nu}{1-\nu} \varepsilon_{xx} \right)_{z=0} = \frac{\theta_d N_1}{a} - P_0, \quad (6.8)$$

де a – параметр кристалічної ґратки. Перший доданок у правій частині рівняння (6.8) визначає механічну напругу, створену адатомами з ненульовим об'ємом ($\theta_d = K\Delta\Omega$, $\Delta\Omega$ – зміна об'єму кристалу одним дефектом, K – модуль пружності), другий доданок – вплив зовнішнього стиску кристалу.

Щоб позбутися неоднорідності в граничній умові (6.8), зробимо заміну:

$$N_1(x, q) = \frac{a}{\theta_d} \left(P_0 + P(q) e^{iqx + \lambda t} \right). \quad (6.9)$$

Тоді підставивши (6.9) у (6.6) з врахуванням (6.4), (6.5) та в наближенні $P \ll \theta_d N_0 / a$, отримаємо вираз для амплітуди $P(q)$,

$$P(q) = - \frac{D_d \left(N_0 + \frac{P_0 a}{\theta_d} \right) \theta_d R q^2 \lambda^2}{k T c_l^2 (\lambda + D_d q^2)} (1 - q^2 l_d^2), \quad (6.10)$$

а гранична умова (6.8) набуде вигляду:

$$\frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\varepsilon_{zz} + \frac{\nu}{1-\nu} \varepsilon_{xx} \right) = P(q) e^{iqx + \lambda t}. \quad (6.11)$$

Граничні умови (6.7) та (6.11) утворюють однорідну систему рівнянь з невідомими R та Q . З умови нетривіальності розв'язків (з умови рівності нулю детермінанта цієї системи) можна отримати дисперсійні залежності $\lambda(q)$.

У наближенні $\lambda^2 / (q^2 c_{l,t}^2) \ll 1$ вираз для інкремента дефектно-деформаційної нестійкості $\lambda(q)$ матиме вигляд:

$$\lambda = D_d q^2 \left(\frac{2 \left(N_0 + \frac{P_0 a}{\theta_d} \right) \theta_d^2 (1 - q^2 l_d^2) (1 + \nu) (1 - 2\nu)}{a k T E} - 1 \right) \quad (6.12)$$

або

$$\lambda = D_d q^2 \left(\frac{T_c (1 - q^2 l_d^2)}{T} - 1 \right), \quad (6.13)$$

$$\text{де } T_c = \frac{2 \left(N_0 + \frac{P_0 a}{\theta_d} \right) \theta_d^2 (1 + \nu) (1 - 2\nu)}{a k E}.$$

На рис. 6.3 приведено результати розрахунку залежності інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від модуля хвильового вектора при різних значеннях тиску P_0 та температури T . Розрахунки $\lambda(q)$ проводились для напівпровідника GaAs з адсорбованими на поверхні атомами In при наступних значеннях параметрів: $l_d = 6.9 \text{ nm}$; $a = 0.565 \text{ nm}$; $E = 85 \text{ GPa}$; $\nu = 0.318$; $D_d = 5 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$; $\theta_d = 10 \text{ eV}$; $N_0 = 4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-6}$. Знак деформаційного потенціалу визначається характером деформації, створеної адатомами.

При температурі 300 K (рис. 6.3, а) у напівпровіднику GaAs при заданих параметрах за відсутності зовнішнього тиску (крива 1) та при тиску меншому, ніж $1,25 \text{ kbar}$ (криві 2, 3), інкремент дефектно-деформаційної нестійкості приймає тільки від'ємні значення, тобто формування періодичної надгратки є неможливим (відбувається з часом затухання акустичної хвилі).

При перевищенні певного критичного значення тиску P_c ($1,25 \text{ kbar}$ при даних параметрах) при температурі 300 K стає можливим формування періодичної нанометрової структури адатомів (крива 4). Тобто під дією тиску спостерігається розширення температурних інтервалів, у межах яких є можливим формування нанокластерів.

При $P > P_c$ залежність інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від модуля хвильового вектора має максимум, який при збільшенні тиску зсувається до більших значень модуля хвильового вектора. При температурі 100 K (рис. 6.3, б) формування періодичної нанометрової структури адатомів є можливим при будь-яких значеннях тиску (в межах пружної деформації).

Значення q_{\max} , при якому інкремент дефектно-деформаційної нестійкості має максимум, визначає період домінуючої структури $d = 2\pi/q_{\max} = 2\sqrt{2}\pi l_d / (1 - T/T_c)$ (рис. 6.4).

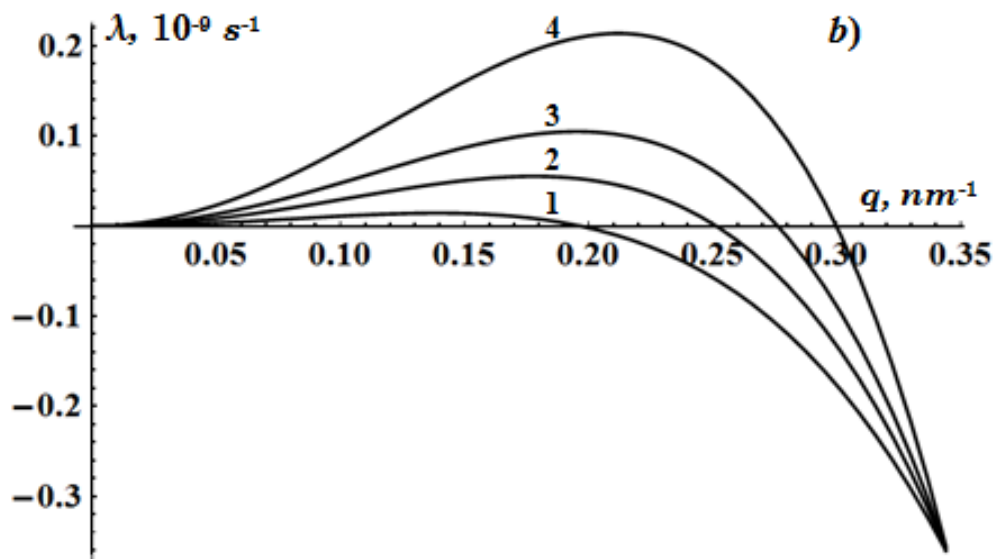
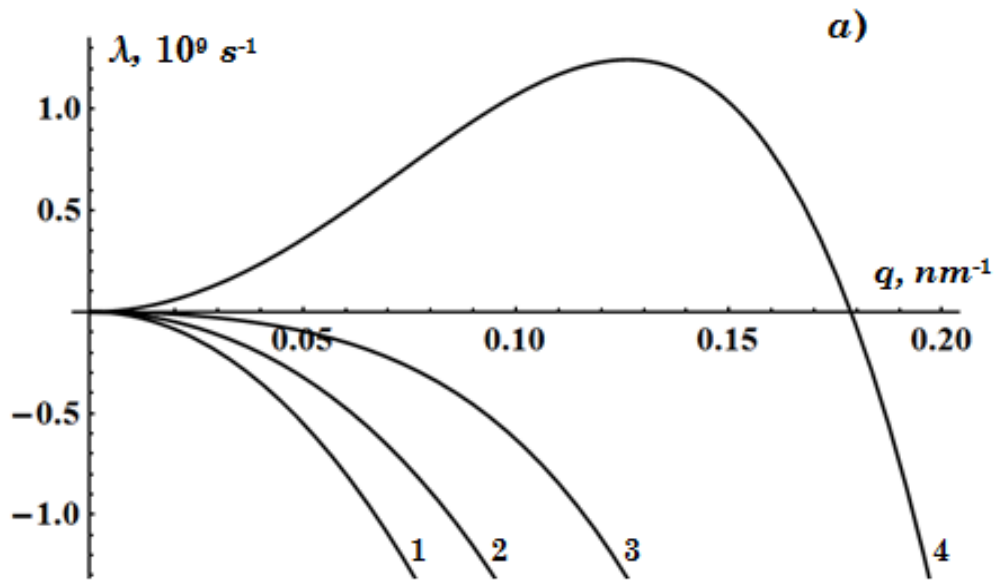


Рис. 6.3. Залежність інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від хвильового вектора при різних значеннях гідростатичного тиску:

1 – $P_0 = 0$; 2 – $P_0 = 0.5 \text{ kbar}$;
 3 – $P_0 = 1 \text{ kbar}$; 4 – $P_0 = 2 \text{ kbar}$;

a) $T = 300 \text{ K}$; b) $T = 100 \text{ K}$

При збільшенні тиску P_0 спостерігається збільшення величини інкремента дефектно-деформаційної нестійкості. Таким чином, при збільшенні стиску напівпровідника процеси формування нанометрових періодичних структур повинні відбуватися швидше. Особливо роль зовнішнього тиску у формуванні періодичної ґратки адатомів є суттєвою при більших температурах (рис. 6.3, 6.4). Процеси самоорганізації адатомів краще відбуваються при менших температурах. Це співпадає з результатами, отриманими у роботі [12], де показано, що формування дефектно-деформаційної ґратки можливе лише при температурі, яка менша за деяке критичне значення. Збільшення деформації стиску напівпровідника дозволяє збільшити критичну температуру, при якій можливі процеси самоорганізації наноструктур.

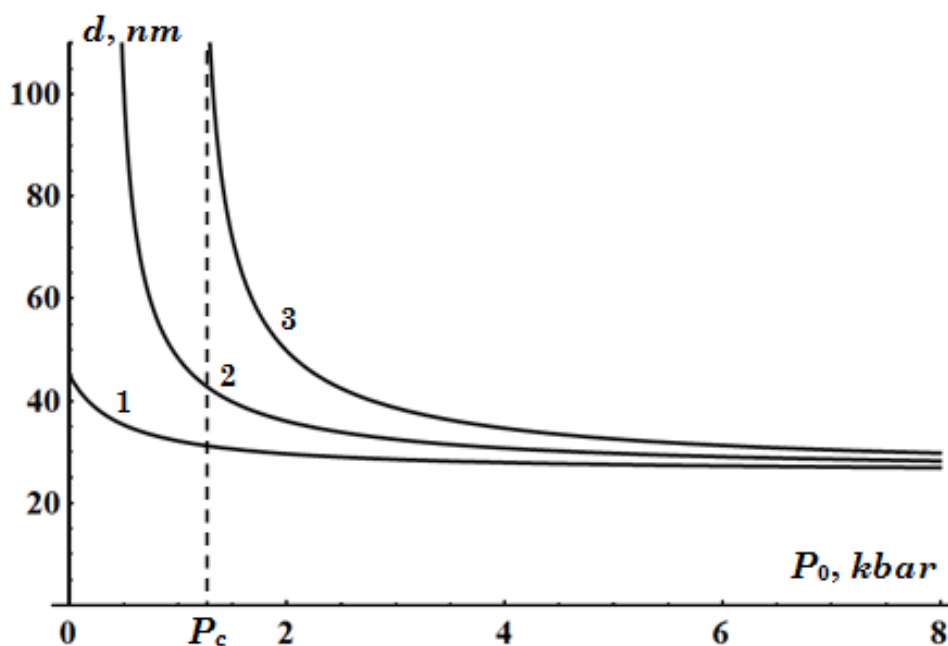


Рис. 6.4. Залежність періоду нанометрової структури адатомів від величини гідростатичного тиску при різних значеннях температури:

1 – $T = 100 \text{ K}$; 2 – $T = 200 \text{ K}$; 3 – $T = 300 \text{ K}$

Як видно з рис. 6.4, збільшення тиску призводить до монотонного зменшення періоду манометрової структури адатомів, який наближається до значення

$$d = 2\sqrt{2}\pi l_d \text{ при } P_0 \rightarrow \infty.$$

При зменшенні температури зменшується критичне значення тиску P_c , при якому починають формуватися періодичні дефектні структури.

При низьких температурах (рис. 6.4, крива 1) спостерігається слабка залежність періоду нанометрової структури від величини тиску.

Також слід відзначити, що зовнішній стиск напівпровідника покращує умови самоорганізації поверхневої наноструктури тільки у випадку адатомів, які є центрами розтягу ($\theta_d > 0$).

6.4. Формування нанометрової структури адатомів у легованому напівпровіднику n -типу при дії всебічного тиску

Деформація, яка виникає на поверхні напівпровідника, призводить до модуляції дна зони провідності і, відповідно, до модуляції електронної густини. Неоднорідне електричне поле, яке виникає, призводить до неоднорідного зміщення вузлів кристалічної ґратки і, відповідно, до зміни амплітуди ПАХ. У роботі [22] показано, що додаткова деформація обумовлена акустoeлектронною взаємодією може бути визначена наступним співвідношенням:

$$\varepsilon^{el} = -\frac{e^2(1-\nu)}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a^2 E} n_1(q) e^{iqx + \lambda t}, \quad (6.14)$$

де n_1 – амплітуда періодичного збурення поверхневої концентрації електронів провідності; $\varepsilon_0, \tilde{\varepsilon}$ – діелектрична стала та діелектрична проникність середовища, відповідно.

Густина електронного струму:

$$j = n\mu_n \frac{d\chi}{dx}, \quad (6.15)$$

де μ_n – рухливість електронів; електрохімічний потенціал χ у наближенні Томаса-Фермі визначається співвідношенням

$$\chi(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n(x) / a \right)^{2/3} - e\varphi(x) + a_c \varepsilon(x), \quad (6.16)$$

$$n(x) = n_0 + n_1(x) = n_0 + n_1(q)e^{iqx+\lambda t}, \quad (6.17)$$

$$\varphi(x) = \varphi(q)e^{iqx+\lambda t}, \quad (6.18)$$

де n_0 – середнє значення поверхневої концентрації електронів; m – ефективна маса електрона; a_c – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності, $\varphi(q)$ – амплітуда періодичного електростатичного потенціалу.

Розв’язавши рівняння неперервності з врахуванням (6.15) та (6.16) у лінійному наближенні ($e\varphi(x) - a_c \varepsilon(x) \ll \chi_0$, $\chi_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0 / a)^{2/3}$), концентрацію електронів провідності можна представити у вигляді [17]:

$$n(x) = n_0 + R_s (e\varphi(x) - a_c \varepsilon(x)), \quad (6.19)$$

$$\text{де } R_s = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{3n_0 a^2}{\pi^4} \right)^{1/3}.$$

Рівняння Пуассона з врахуванням (6.17) та (6.18) має вигляд:

$$-q^2 \varphi(q) = \frac{e}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a} n_1(q). \quad (6.20)$$

Підставивши (6.19) в (6.20) з врахуванням (6.4), (6.17) та (6.18), отримаємо вирази для амплітуд періодичного електростатичного потенціалу $\varphi(q)$ та поверхневої концентрації електронів провідності $n_1(q)$:

$$\varphi(q) = -\frac{g^2 a_c / e}{q^2 + g^2} \frac{\lambda^2}{c_l^2} R, \quad (6.21)$$

$$n_1(q) = \frac{R_s a_c q^2}{q^2 + g^2} \frac{\lambda^2}{c_l^2} R,$$

$$\text{де } g = \sqrt{\frac{e^2 R_s}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a}}.$$

Тоді додаткова деформація, обумовлена акусто-електронною взаємодією може бути визначена наступним співвідношенням:

$$\varepsilon^{el} = -\frac{a_c g^2 q^2 (1-\nu)}{(q^2 + g^2) a E} \frac{\lambda^2}{c_l^2} R e^{iqx + \lambda t}. \quad (6.22)$$

Сумарна деформація на поверхні напівпровідника з врахуванням (6.4) та (6.22):

$$\varepsilon^1 = \varepsilon + \varepsilon^{el} = -\frac{\lambda^2}{c_l^2} (1 - \beta(q)) R e^{iqx + \lambda t}, \quad (6.23)$$

$$\text{де } \beta(q) = \frac{a_c g^2 q^2 (1-\nu)}{(q^2 + g^2) a E}.$$

Слід зазначити, що для будь-яких значень q параметр $|\beta| < 1$. Для діелектриків та напівпровідників з незначним ступенем легування $|\beta| \ll 1$. Тому вплив акустоелектронної взаємодії на формування поверхневої періодичної нанометрової структури є незначним. Цей випадок розглянуто у попередньому пункті. При збільшенні концентрації електронів провідності вплив акустоелектронної взаємодії зростає. І тому для встановлення умов формування нанометрової структури адатомів при дії всебічного тиску слід враховувати взаємодію електронної підсистеми з ПАХ.

Підставивши (6.23) в (6.6), отримаємо вираз для амплітуди періодичного збурення концентрації адсорбованих атомів $N_1(q)$ з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії. Проробивши дії, аналогічно до того, як описано у попередньому пункті (формули (6.7) – (6.10)), отримаємо вираз для інкремента дефектно-деформаційної нестійкості $\lambda(q)$:

$$\lambda(q) = D_d q^2 \left(\frac{2 \left(N_0 + \frac{P_0 a}{\theta_d} \right) \theta_d^2 (1 - q^2 l_d^2) \left(1 - \frac{a_c g^2 q^2 (1-\nu)}{(q^2 + g^2) a E} \right) (1 + \nu)(1 - 2\nu)}{akTE} - 1 \right) \quad (6.24)$$

або

$$\lambda = D_d q^2 \left(\frac{T_c (1 - q^2 l_d^2) \left(1 - \frac{a_c g^2 q^2 (1 - \nu)}{(q^2 + g^2) a E} \right)}{T} - 1 \right). \quad (6.25)$$

На рис. 6.5 приведено результати розрахунку залежності інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від модуля хвильового вектора при різних значеннях концентрації електронів n_0 , тиску P_0 та різних значеннях температури.

Розрахунки $\lambda(q)$ проводились для напівпровідника GaAs при наступних значеннях параметрів: $a_c = -7.17 \text{ eV}$; $m = 0.065 m_0$; $\varepsilon = 16$.

В результаті взаємодії електронної підсистеми з ПАХ при збільшенні ступеня легування напівпровідника спостерігається збільшення інкремента дефектно-деформаційної нестійкості та зміщення його максимуму в сторону більших значень модуля хвильового вектора. При невеликих тисках (рис. 6.5, криві 1, 2) роль акустoeлектронної взаємодії є несуттєвою. Збільшення тиску (рис. 6.5, криві 3 – 5) та температури (рис. 6.5, *a, b*) призводить до підсилення впливу акустoeлектронних ефектів. Збільшення інкремента дефектно-деформаційної нестійкості означає зменшення часу формування періодичної надгратки адсорбованих атомів.

Збільшення ступеня легування напівпровідника призводить до зменшення періоду нанометрової надгратки (рис. 6.6). При збільшенні концентрації електронів провідності до $n_0 = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ при температурі 300 K період дефектної структури зменшується від 50 nm (рис. 4, крива 1) до 42 nm (рис. 4, крива 3). Роль акустoeлектронної взаємодії є більш суттєвою при незначних тисках ($P_0 < 2 \text{ kbar}$). Як видно з рис. 6.6, збільшення тиску призводить до монотонного зменшення періоду нанометрової структури адатомів, який наближається до значення $d = 2\sqrt{2}\pi l_d$ при $P_0 \rightarrow \infty$, незалежно від ступеня легування.

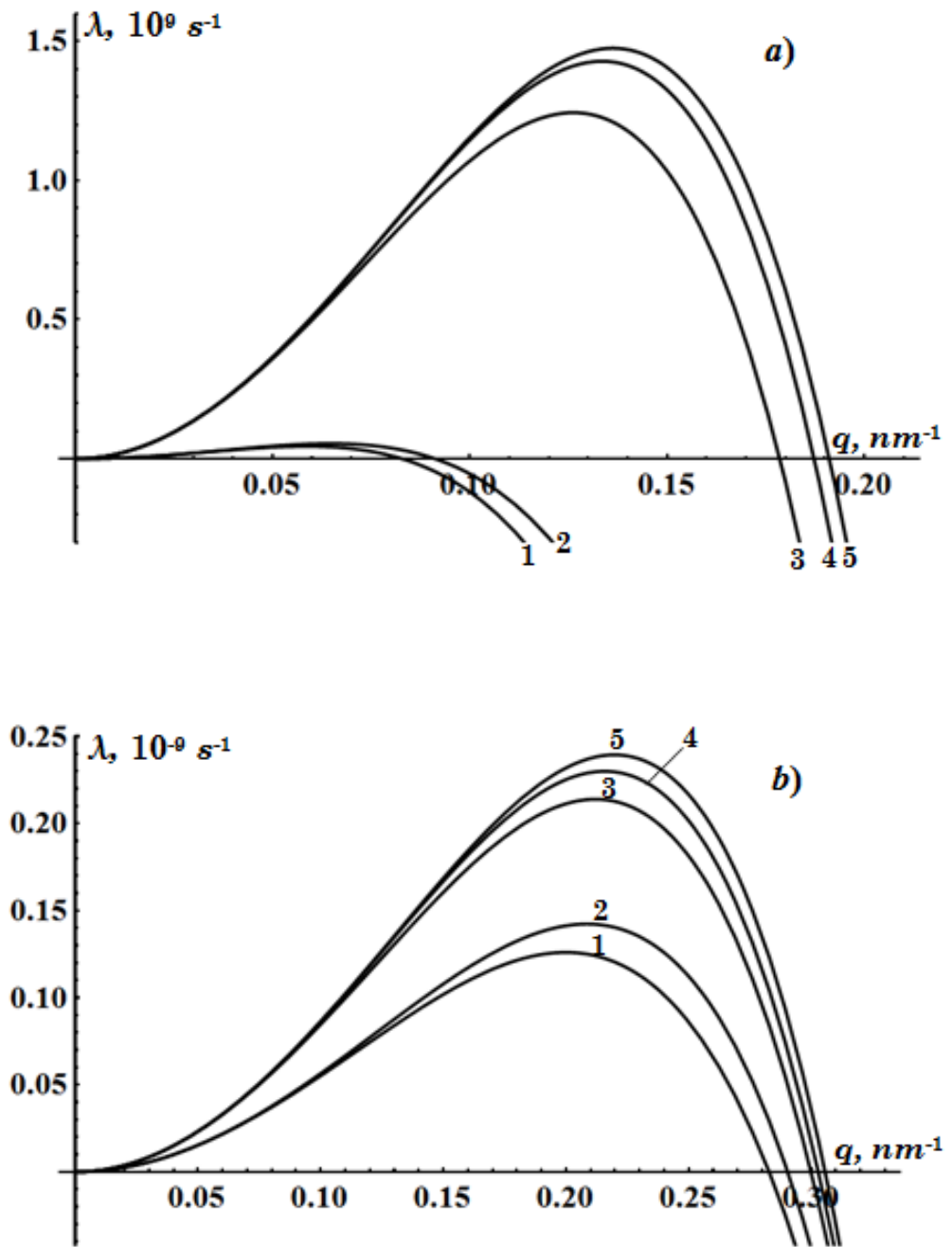


Рис. 6.5. Залежність інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від хвильового вектора при різних значеннях концентрації електронів та гідростатичного тиску:

$$P_0 = 1.3 \text{ kbar} (1; 2); \quad P_0 = 2 \text{ kbar} (3; 4; 5);$$

$$n_0 = 0 (1; 3); \quad n_0 = 10^{11} \text{ cm}^{-2} (4); \quad n_0 = 10^{13} \text{ cm}^{-2} (2; 5);$$

$$a) T = 300 \text{ K}; \quad b) T = 100 \text{ K}$$

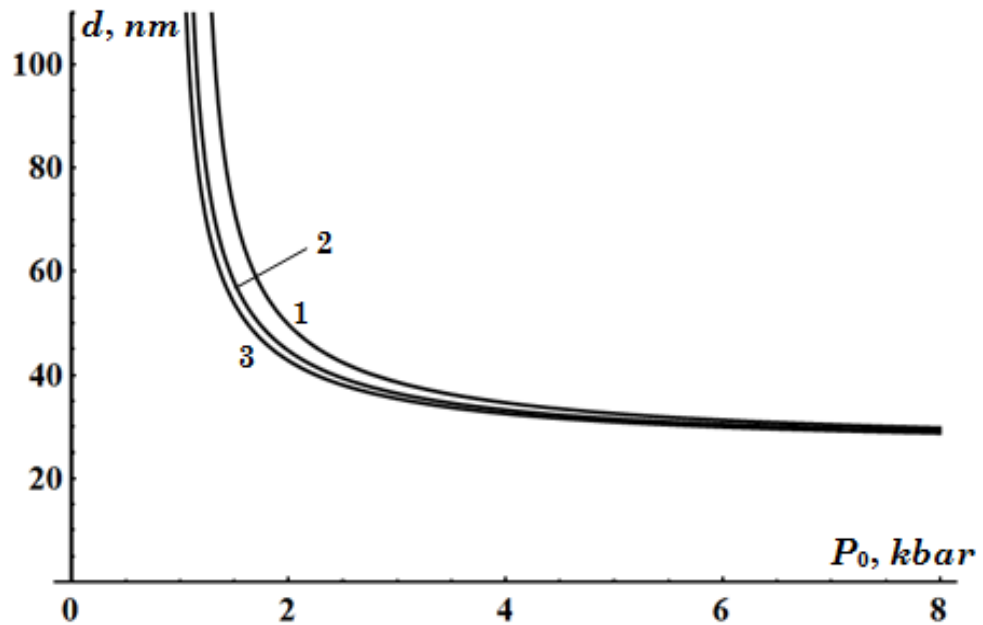


Рис. 6.6. Залежність періоду нанометрової структури адатомів від величини гідростатичного тиску при температурі $T = 100\text{ K}$ при різних значеннях концентрації електронів:

$$1 - n_0 = 0; \quad 2 - n_0 = 10^{11}\text{ cm}^{-2}; \quad 3 - n_0 = 10^{13}\text{ cm}^{-2}$$

Змінюючи, концентрацію електронів провідності, можна керувати критичними параметрами (температура, тиск, концентрація адатомів), при яких відбувається формування дефектно-деформаційної структури.

Зокрема, з рис. 6.6 видно, що збільшення концентрації електронів провідності призводить до зменшення критичного тиску P_c , при якому починають формуватися періодичні дефектні структури. При низьких температурах цей ефект є непомітним, оскільки при будь-яких тисках можливе формування періодичної нанометрової структури. Також слід зазначити, що збільшення концентрації електронів провідності є причиною збільшення критичної температури T_c , нижче якої відбуваються процеси самоорганізації.

Отримані результати якісно співпадають з експериментальними даними, отриманими у роботі [35], де досліджено вплив різних видів механічних навантажень на розміри квантових точок InAs/GaAs.

Створюючи різні навантаження в різних областях напівпровідникової матриці, можна прогнозовано керувати розмірами квантових точок. Важливими характеристиками масиву квантових точок є однорідність їх розмірів та форма. Очевидно, що зовнішні деформаційні поля впливають на ці характеристики. Однак, проведення таких теоретичних досліджень є можливими тільки в межах нелінійної моделі.

6.5. Вплив гідростатичного тиску на температуру формування поверхневої надгратки адатомів

Як видно з попередніх результатів формування поверхневої надгратки відбувається тільки при температурах менших за деяке критичне значення T_c . Керувати цією температурою можна за допомогою впливу всебічного тиску.

На рис. 6.7 приведено залежність критичної температури, менше

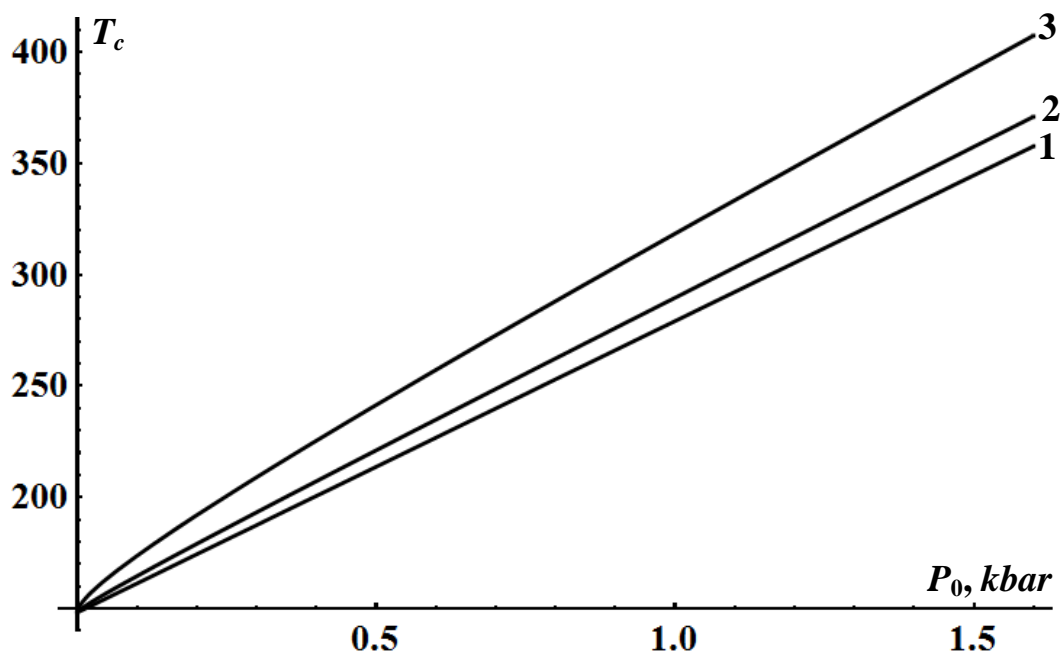


Рис. 6.7. Залежність критичної температури від величини гідростатичного тиску при різних значеннях концентрації електронів:

1 – $n_0 = 0$; 2 – $n_0 = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; 3 – $n_0 = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$

за яку формується поверхнева надгратка адатомів, які є центрами розтягу ($\theta_d > 0$), від величини всебічного тиску. Збільшення тиску призводить до збільшення критичної температури. Причому цей ефект краще проявляється у сильнолегованих напівпровідниках.

Для дефектів, які є центрами стиску ($\theta_d < 0$), збільшення всебічного тиску призводить, навпаки, до зменшення критичної температури.

6.6. Висновки до розділу 6

1. Розвинуто теорію нуклеації періодичних структур адатомів при дії всебічного тиску. Запропонована теорія може бути використана для опису початкової стадії формування нанокластерів як методом лазерного опромінення, так і методом молекулярно-променевої епітаксії, а також у гетероепітаксійних системах за наявності значної невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів.
2. Показано, що вплив всебічного тиску на напівпровідникову матрицю дозволяє розширити температурні інтервали, в межах яких відбуваються процеси формування нанокластерів. Для напівпровідника GaAs розраховано критичні значення тиску, при яких формуються нанокластери, залежно від температури.
3. Встановлено, що під впливом всебічного тиску можна зменшити критичну концентрацію адсорбованих атомів (яка визначається, інтенсивністю лазерного опромінення), при перевищенні якої можливі процеси самоорганізації.
4. В межах розробленої теорії проведено розрахунки періоду нанометрової структури адатомів Ga при дії всебічного тиску як для нелегованого напівпровідника GaAs, так і для напівпровідника n -типу. Встановлено, що при збільшенні тиску та ступеня легування напівпровідника спостерігається монотонне зменшення періоду нанометрової структури адатомів.

РОЗДІЛ 7. Вплив електричного поля на нуклеацію нанометрової періодичної структури адатомів у напівпровіднику GaAs під впливом лазерного опромінення

7.1. Вступ

У експериментальних роботах [156, 157] досліджено вплив зовнішнього електричного поля на формування самоорганізованих наноструктур. Зокрема, у роботі [156] показано, що зовнішнє електричне поле збільшує густину та змінює розміри квантових дрітків CuO.

Визначальним фактором у формуванні поверхневої надгратки адатомів є пружні поля створені дефектами. У роботах [25-29, 158] показано, що зовнішній гідростатичний тиск, ультразвукова хвиля та легування ізовалентними домішками повинні сприяти покращенню умов формування поверхневих наноструктур. Періодична деформація, яка виникає на поверхні напівпровідника призводить до модуляції дна зони провідності і, відповідно, до модуляції електронної густини. Неоднорідне електричне поле, яке виникає, призводить до неоднорідного зміщення вузлів кристалічної ґратки і, відповідно, до зміни амплітуди ПАХ [20, 22]. Тому можна очікувати, що при розташуванні напівпровідника в зовнішньому електричному полі, можна змінювати умови формування лазерно-індукованих періодичних поверхневих наноструктур і прогнозовано керувати їх параметрами за рахунок взаємодії електричного поля із неоднорідно розподіленими по поверхні вільними носіями струму.

Завдяки високій рухливості носіїв заряду, широке використання при виробництві квантово-розмірних структур та високочастотних лазерів на їх основі знайшов арсенід галію. Значна увага дослідників приділяється лазерній модифікації морфології приповерхневих шарів

GaAs, при якій умови формування нанокластерів є керованим процесом [15, 159]. Окрім цього, GaAs має одну з найбільших констант деформаційного потенціалу зони провідності (більша тільки в Ge), що робить зонну провідності та електронну підсистему чутливими до деформації. Тому очікуваним є те, що суттєвою буде взаємодія електричного поля із періодичною деформацією. У даній роботі досліджено вплив зовнішнього електричного поля, перпендикулярного до ПАХ на нуклеацію нанометрової періодичної структури адатомів у напівпровіднику GaAs (100).

7.2. Модель нуклеації нанометрової структури при дії електричного поля

Рівняння для вектора зміщення \vec{u} пружного середовища має вигляд

$$\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = c_l^2 \Delta \vec{u} + (c_l^2 - c_t^2) \text{grad}(\text{div } \vec{u}), \quad (7.1)$$

де c_l , c_t – поздовжня і поперечна швидкості звуку, відповідно.

Нехай поверхня напівпровідника співпадає з площиною $z = 0$ (вісь z напрямлена в глибину кристалу) і, припустимо, що вздовж осі x виникає поверхневе збурення пружного середовища, яке задамо у вигляді статичної ПАХ, яка швидко затухає вглибину напівпровідника та має наростаючу з часом амплітуду:

$$u_x = -iqR e^{iqx + \lambda t - k_l z} - ik_t Q e^{iqx + \lambda t - k_t z}, \quad (7.2)$$

$$u_z = k_l R e^{iqx + \lambda t - k_l z} + qQ e^{iqx + \lambda t - k_t z}, \quad (7.3)$$

де $k_{l,t}^2 = q^2 + \frac{\lambda^2}{c_{l,t}^2}$, λ – інкремент дефектно-деформаційної нестійкості, R ,

Q – амплітуди ПАХ.

Тоді деформація ε на поверхні напівпровідника ($z = 0$)

$$\varepsilon = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{\lambda^2}{c_l^2} R e^{iqx + \lambda t}. \quad (7.4)$$

Розглянемо випадок, коли напівпровідник містить домішки – іонізовані донори, вільні електрони та нейтральні адатоми. Умова електронейтральності має вигляд

$$n_0 = N_d^+, \quad (7.5)$$

де N_d^+ , n_0 – поверхнева концентрація іонізованих донорів та просторово-однорідне значення поверхневої концентрації електронів.

Періодична поверхнева деформація призводить до просторово-неоднорідного перерозподілу адатомів $N(x)$, модуляції дна зони провідності і, відповідно, перерозподілу концентрації електронів провідності $n(x)$ та електростатичного потенціалу $\varphi(x)$:

$$N(x) = N_0 + N_1(x) = N_0 + N_1(q)e^{iqx+\lambda t}, \quad (7.6)$$

$$n(x) = n_0 + n_1(x) = n_0 + n_1(q)e^{iqx+\lambda t}, \quad (7.7)$$

$$\varphi(x) = \varphi(q)e^{iqx+\lambda t}, \quad (7.8)$$

де $N_1(q)$, $n_1(q)$, $\varphi(q)$ – амплітуди відповідних періодичних збурень, N_0 – просторово-однорідне значення поверхневої концентрації адатомів.

Запишемо рівняння Пуассона, яке з врахуванням (7.5), (7.7) та (7.8) прийме вигляд

$$-q^2\varphi(q) = \frac{e}{\varepsilon_0\tilde{\varepsilon}a}n_1(q), \quad (7.9)$$

де ε_0 , $\tilde{\varepsilon}$ – діелектрична стала та діелектрична проникність середовища.

Рівняння для концентрації адатомів має вигляд

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - D_d \frac{\theta_d}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left(N \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon + l_d^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^2} \right) \right), \quad (7.10)$$

де D_d – поверхневий коефіцієнт дифузії; k_B – стала Больцмана; T – температура; θ_d – деформаційний потенціал; l_d – характерна довжина взаємодії адатомів з атомами ґратки. Другий доданок виражає взаємодію адатомів із деформаційним полем із врахуванням нелокальної взаємодії [155]. Дефект, який потрапляє на поверхню напівпровідника призводить до зміни його об'єму та енергії, а початкова флуктуація деформації при певних умовах зумовлює виникнення деформаційно-індукованих потоків адатомів. У

неоднорідному деформаційно-концентраційному полі з'являються сили, пропорційні градієнтам концентрації та деформації.

З врахуванням (7.4), (7.6) та у наближенні $N_1 \ll N_0$, рівняння (7.10) запишемо у вигляді

$$\lambda N_1(q) = -D_d q^2 N_1(q) - \frac{D_d N_0 \theta_d}{k_B T} \left(\frac{\lambda^2}{c_l^2} R q^2 (1 - q^2 l_d^2) \right). \quad (7.11)$$

Густина електронного струму

$$j = -n \mu_n \frac{d\chi}{dx}, \quad (7.12)$$

де μ_n – рухливість електронів; електрохімічний потенціал χ визначається співвідношенням

$$\chi(x) = k_B T \ln \frac{n(x)}{N_i} - e\phi(x) + a_c \varepsilon(x), \quad (7.13)$$

де $N_i = 2 \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2}$ – ефективна густина станів; a_c – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності. Тоді рівняння неперервності з врахуванням (7.12), (7.13) можна записати у вигляді

$$e \frac{\partial n}{\partial t} = k_B T \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{n}{N_i} \right) - e \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + a_c \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right). \quad (7.14)$$

З врахуванням (7.4), (7.7)-(7.9) рівняння (7.14) запишемо у вигляді

$$n_1(q) \left(e\lambda + k_B T \mu_n q^2 + \frac{e^2 n_0 \mu_n}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a} \right) = a_c n_0 \mu_n q^2 \frac{\lambda^2}{c_l^2} R, \quad (7.15)$$

З (7.11) та (7.15) отримаємо вирази для амплітуд поверхневої концентрації адатомів $N_1(q)$ та електронів провідності $n_1(q)$:

$$N_1(q) = - \frac{D_d N_0 \theta_d}{k_B T (\lambda + D_d q^2)} \left(\frac{\lambda^2}{c_l^2} R q^2 (1 - q^2 l_d^2) \right), \quad (7.16)$$

$$n_1(q) = \frac{a_c n_0 \mu_n q^2}{e\lambda + k_B T \mu_n q^2 + \frac{e^2 n_0 \mu_n}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} a}} \frac{\lambda^2}{c_l^2} R. \quad (7.17)$$

Таким чином на поверхні напівпровідника виникає не тільки періодична модуляція рельєфу поверхні із накопиченням адатомів в максимумах або мінімумах деформації (залежно від знаку деформаційного потенціалу θ_d), але й поверхнева модуляція електронної густини (рис. 7.1, а). Як видно з формул (7.4), (7.6), (7.7), (7.16) та (7.17) періодично розподілені деформація $\varepsilon(x)$, поверхнева концентрація адатомів $N_1(x)$ та концентрація електронів $n_1(x)$ знаходяться в однаковій фазі при $\theta_d > 0$ (виконується умова $ql_d < 1$) та $a_c < 0$. При $\theta_d < 0$ розподіл поверхневої концентрації адатомів $N_1(x)$ та концентрації електронів $n_1(x)$ знаходяться в протифазі. Причому, оскільки для GaAs константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності $a_c < 0$, то надлишок електронів буде спостерігатися в тих областях поверхні, де накопичуються адатоми, які є центрами розтягу ($\theta_d = K\Delta\Omega > 0$, $\Delta\Omega$ – зміна об'єму кристалу одним адсорбованим атомом, K – модуль всебічного стиску) і, навпаки, в тих областях поверхні, де накопичуються адатоми, які є центрами стиску, буде недостача електронів порівняно із середнім значенням (рис. 7.1, а). Тобто, дефекти виду центрів розтягу та електрони накопичуються в максимумах деформації. І, навпаки, в мінімумах деформації накопичуються дефекти виду центрів стиску та спостерігається зменшення концентрації електронів порівняно з їх просторово-однорідним значенням. Це пояснюється тим, що деформаційний потік електронів ($j = -a_c n \mu_n \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$) напрямлений в сторону збільшення деформації і електрони локалізують в області з меншою потенціальною енергією (відбувається локальне зміщення дна зони провідності на величину $\Delta E_c = a_c \varepsilon$). І одночасно, деформаційний потік адатомів (другий доданок у формулі (7.10)), які є центрами розтягу, також напрямлений в сторону збільшення деформації, а центрів стиску – в сторону зменшення деформації.

Контрольований параметр N_0 визначається інтенсивністю лазерного опромінення.

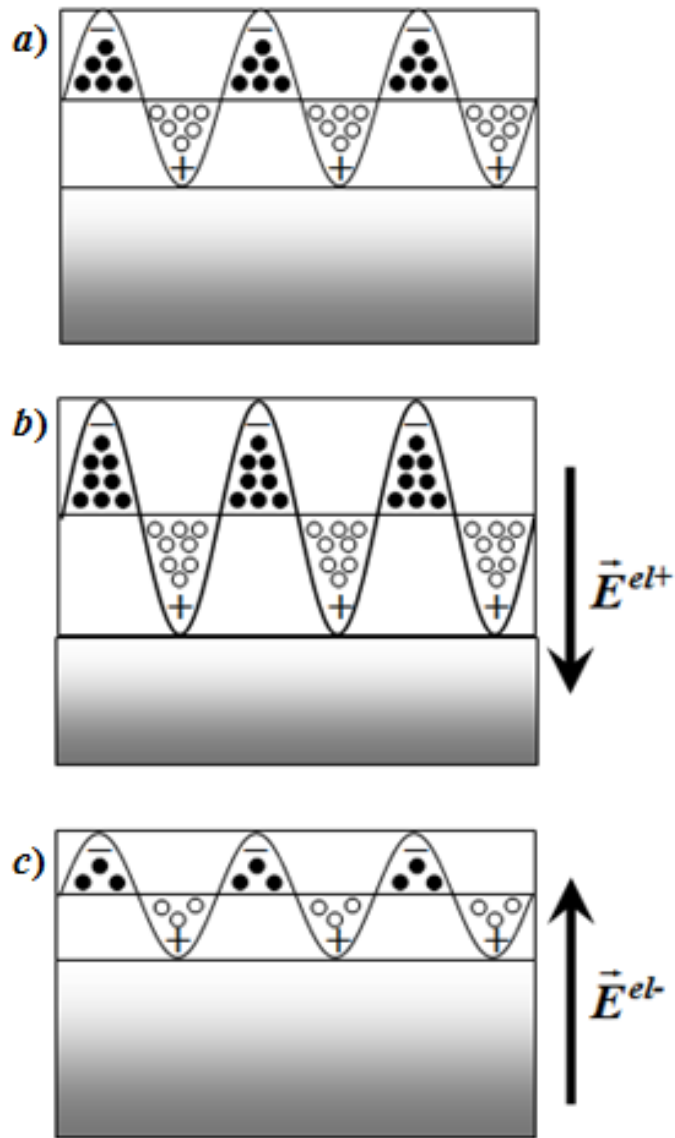


Рис. 7.1. Геометрична модель формування поверхневої надгратки адатомів під впливом електричного поля:

- – дефекти виду центрів розтягу;
- – дефекти виду центрів стиску

Розташувавши напівпровідник в електричному полі, перпендикулярному до напрямку поширення акустичної хвилі (рис. 7.1, b, c), створюємо додатковий тиск на поверхні напівпровідника

$$\sigma_{zz}^{el} = en(x)E^{el}. \quad (7.18)$$

Причому у випадку, коли вектор напруженості електричного поля \vec{E}^{el} напрямлений в глибину кристалу (рис. 7.1, b), область поверхні, де накопичуються адатоми, які є центрами розтягу і, відповідно,

електрони, зазнаватиме додаткового розтягу, а область, в якій накопичуються адатоми виду центрів стиску та спостерігається недостача електронів – додаткового стиску. Це в свою чергу призводить до виникнення додаткового деформаційно-дифузійного потоку адатомів (для дефектів виду центрів розтягу у напрямку зростання деформації, для дефектів виду центрів стиску – у протилежному напрямку). При зміні напрямку електричного поля (рис. 7.1, с) додатковий тиск обумовлений зовнішнім електричним полем призводить до зменшення градієнтів деформації на поверхні напівпровідника і, відповідно, до де локалізації адатомів.

Просторово-неоднорідний розподіл адатомів модулює поверхневу енергію $F(x)$, що призводить до виникнення латеральної механічної напруги $\sigma_{xz} = \frac{\partial F(N(x))}{\partial x}$, яка компенсується напругою зсуву у середовищі [155]:

$$F(N(x)) \approx F(N_0) + \left. \frac{\partial F}{\partial N} \right|_{N=N_0} N_1(x), \quad \left. \frac{\partial F}{\partial N} \right|_{N=N_0} \approx \frac{\theta_d^2 N_0}{aK}.$$

Гранична умова, що виражає баланс латеральних напружень має вигляд

$$\frac{E}{2(1+\nu)} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right)_{z=0} = \frac{\partial F(N(x))}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial N} \frac{\partial N_1(x)}{\partial x}, \quad (7.19)$$

де E , ν – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона.

Окрім цього, у результаті взаємодії адатомів з атомами напівпровідника на поверхні виникає нормальна механічна напруга, і, відповідна гранична умова має вигляд

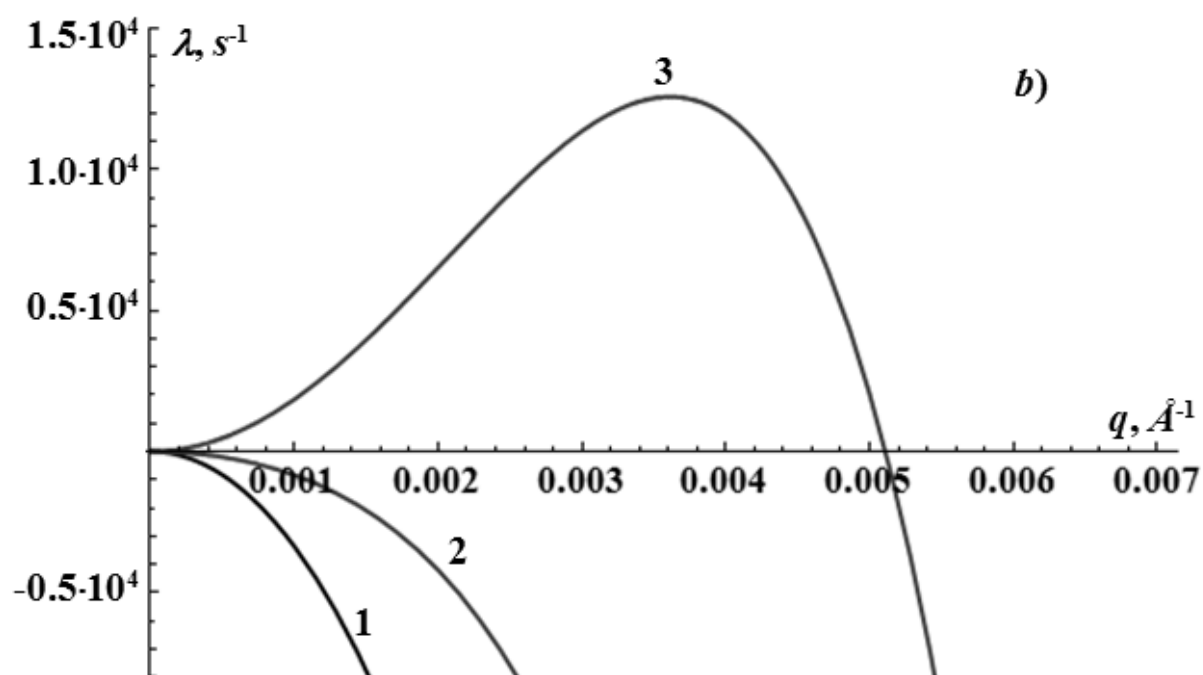
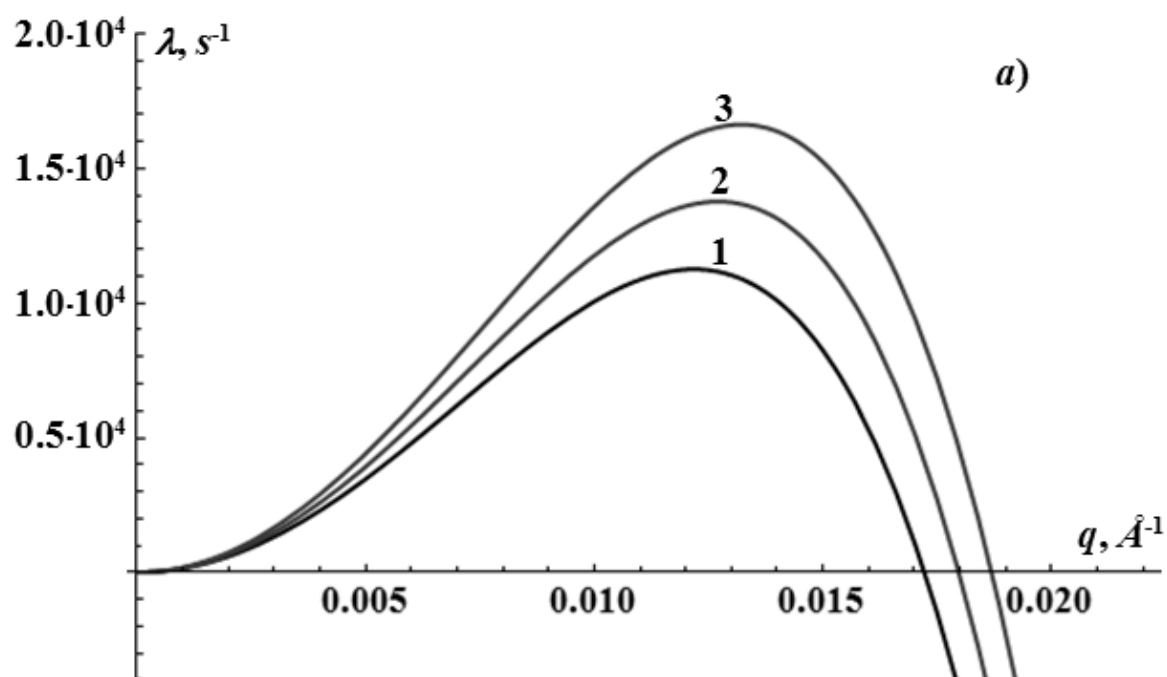
$$\frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\nu}{1-\nu} \frac{\partial u_x}{\partial x} \right)_{z=0} = \frac{\theta_d}{a} N_1(x) + en(x)E. \quad (7.20)$$

Таким чином отримано систему лінійних однорідних рівнянь (7.19), (7.20) відносно амплітуд R та Q і з умови нетривіальності розв'язків (з умови рівності нулю детермінанта цієї системи) можна отримати дисперсійні залежності $\lambda(q)$.

7.3. Формування поверхневої надгратки в GaAs при дії електричного поля

Розрахунки $\lambda(q)$ проводились для напівпровідника GaAs при наступних значеннях параметрів: $N_0 = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; $l_d = 2,9 \text{ nm}$; $a = 0,565 \text{ nm}$; $c_l = 4400 \text{ m/s}$; $c_t = 2475 \text{ m/s}$; $\rho = 5320 \text{ kg/m}^3$; $a_c = -7,17 \text{ eV}$; $D_d = 5 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$; $\theta_d = 10 \text{ eV}$; $\tilde{\epsilon} = 12$; $\mu_n = 8 \cdot 10^3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$.

На рис. 7.2. приведено результати розрахунку залежності інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від модуля хвильового вектора при різних значеннях концентрації електронів провідності, температури та напруженості електричного поля з напрямком представленим на рис. 7.1, b (E^{el+}). Така залежність має максимум, який при збільшенні напруженості електричного зсувається в сторону більших значень модуля хвильового вектора. Формування поверхневої надгратки адатомів можливе лише при додатних значеннях інкремента дефектно-деформаційної нестійкості λ . Як бачимо з рис. 7.2 формування надгратки можливе тільки при температурі меншій за деяке критичне значення T_c . Формування поверхневої надгратки визначається співвідношенням між звичайним дифузійним потоком адатомів (перший доданок рівняння (7.10)) та деформаційним потоком (другий доданок рівняння (7.10)). При високих температурах визначальним є перший доданок і з часом концентрація адатомів по поверхні вирівнюється – формування поверхневої надгратки є неможливим ($\lambda < 0$). При зменшенні температури збільшується вклад деформаційного потоку адатомів, який при меншому значенні температури від критичного значення T_c стає визначальним. У цьому випадку дефекти накопичуються в максимумах (мінімумах) деформації і формується поверхнева надгратка. Зокрема, при температурі 100 K (рис. 7.2, b) при відсутності електричного поля формування поверхневої надгратки при заданій інтенсивності лазерного опромінення є неможливим. Але збільшення напруженості електричного поля призводить до зміни знаку



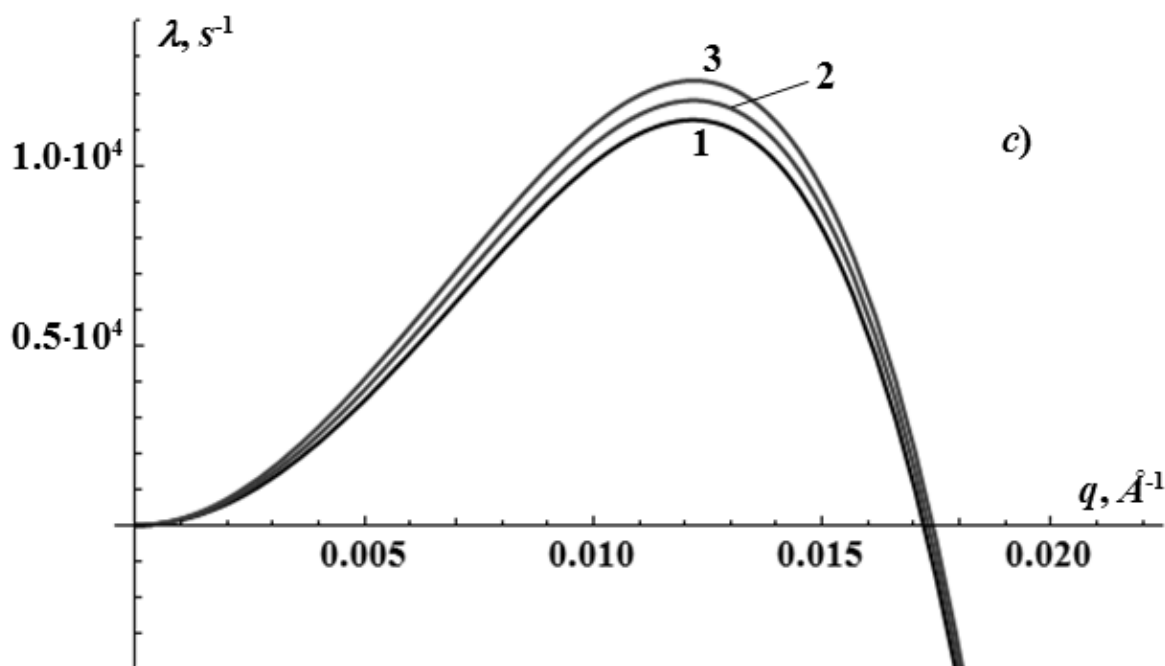


Рис. 7.2. Залежність інкремента дефектно-деформаційної нестійкості від хвильового вектора при наступних значеннях параметрів:

$$T = 70 \text{ K } (a, c); T = 100 \text{ K } (b); n_0 = 10^{12} \text{ cm}^{-2} (a, b); n_0 = 10^9 \text{ cm}^{-2} (c) \\ 1 - E^{el} = 0; \quad 2 - E^{el+} = 30 \text{ kV/cm}; \quad 3 - E^{el+} = 80 \text{ kV/cm};$$

інкремента дефектно-деформаційної нестійкості λ (рис. 7.2, б, крива 7.3), що робить можливим формування надгратки адатомів. Зменшення концентрації електронів при незмінній температурі призводить до зменшення величини інкремента дефектно-деформаційної нестійкості (рис. 7.2, с). Таким чином, у напівпровіднику з більшим ступенем легування донорними домішками, процеси формування нанометрових періодичних структур повинні відбуватись швидше.

Значення q_{\max} , при якому інкремент дефектно-деформаційної нестійкості має максимум, визначає період домінуючої структури

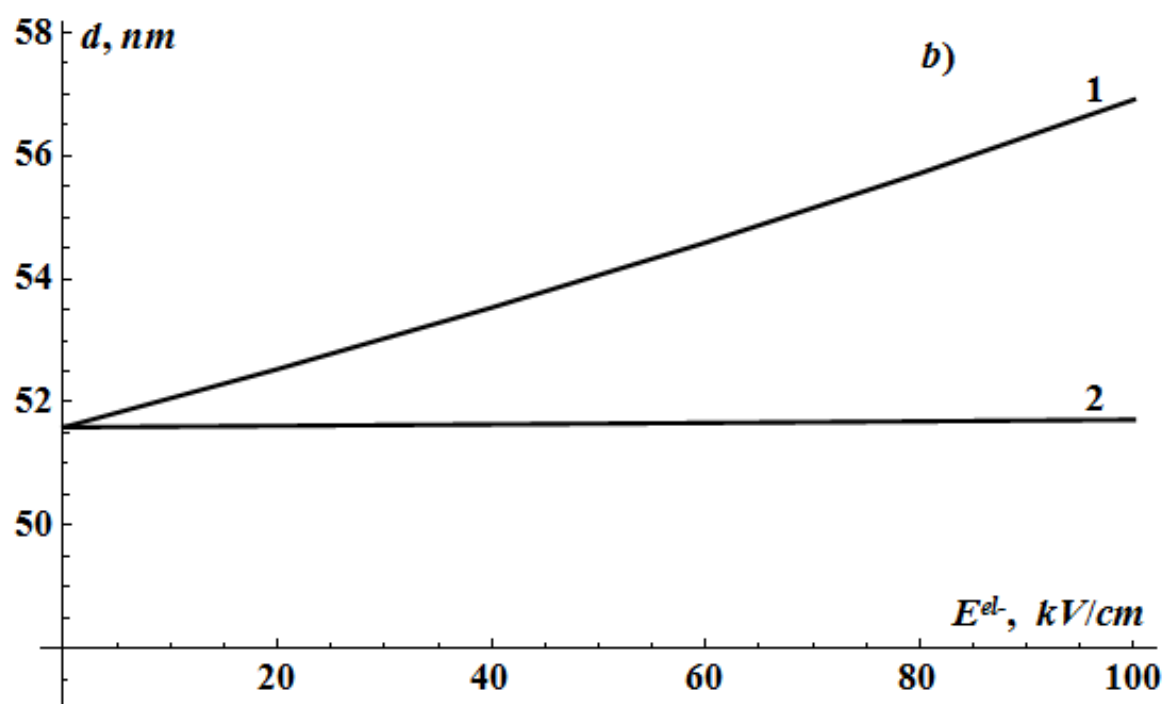
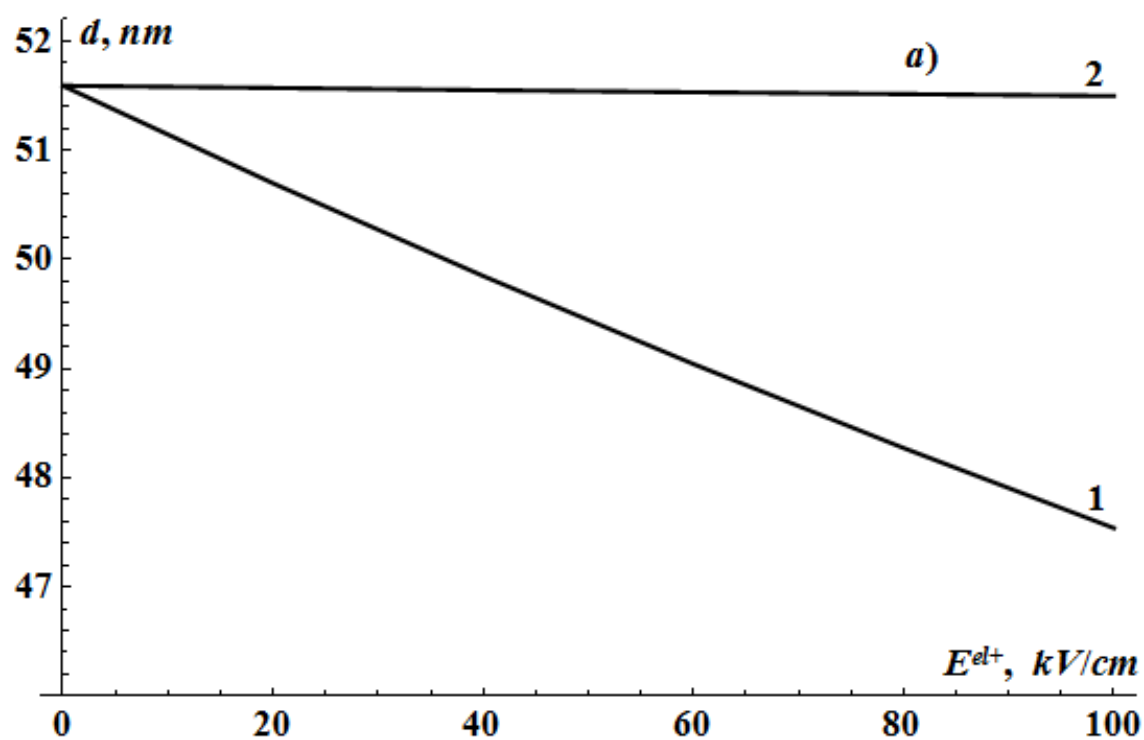
$$d = \frac{2\pi}{q_{\max}} \quad (\text{рис. 7.3}).$$

На рис. 7.3 представлено залежність періоду поверхневої надгратки адатомів від напруженості електричного поля

при різних значеннях концентрації електронів, температури та різних напрямках електричного поля. Збільшення напруженості електричного поля призводить до зменшення (рис. 7.3, а, с) та збільшення (рис. 7.3, б) періоду поверхневої надгратки адатомів залежно від напрямку електричного поля. Вплив електричного поля на період поверхневої дефектно-деформаційної структури проявляється лише в сильнолегованих напівпровідниках. Зокрема, у напівпровіднику GaAs з поверхневою концентрацією електронів $n_0 = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ за температури 70 K при збільшенні напруженості електричного поля до 60 kV/cm період надгратки змінюється на $2,5 \text{ nm}$. А у напівпровіднику з поверхневою концентрацією електронів $n_0 = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ практично не змінюється (рис. 7.3, а, б).

Суттєвим вплив електричного поля є при температурах, які незначно вищі від критичної температури T_c (рис. 7.3, с), причому напрям електричного поля відповідає рис. 7.1, б (E^{el+}). У цьому випадку у відсутності електричного поля дефектно-деформаційні структури не виникають при заданій інтенсивності лазерного опромінення. Однак існує деяке критичне значення напруженості електричного поля E_c^{el} , при перевищенні якого є можливим формування поверхневої періодичної структури адатомів. Або це можна інтерпретувати як розширення температурних інтервалів під дією електричного поля, в межах яких є можливим формування поверхневої надгратки.

Зміна напрямку електричного поля (рис. 7.1, с) призводить до погіршення умов формування самоорганізованих наноструктур незалежно від знаку деформаційного потенціалу θ_d , зокрема до зменшення критичної температури та збільшення періоду поверхневої надгратки (рис. 7.3, б). Це пояснюється тим, що у цьому випадку локальна деформація обумовлена дією електричного поля носить протилежний характер до деформації створеної адатомами (рис. 7.1).



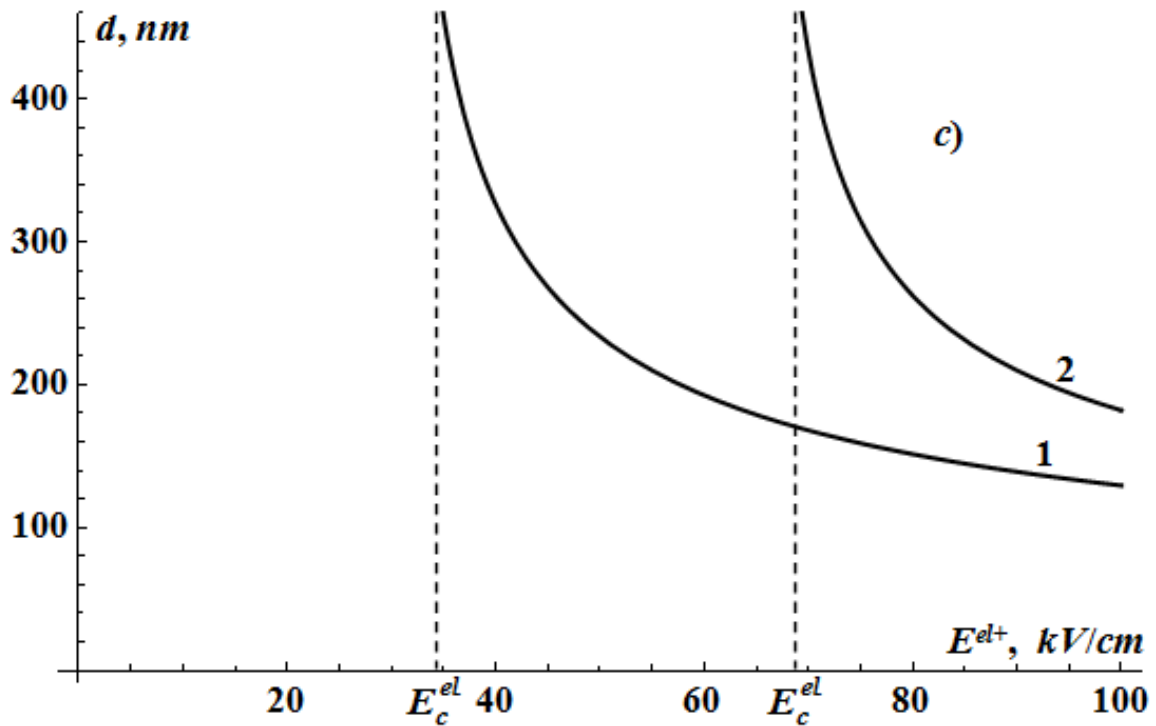


Рис. 7.3. Залежність періоду поверхневої дефектно-деформаційної структури від напруженості електричного поля при різних його напрямках та при різних значеннях концентрації електронів:

$$T = 70 \text{ K } (a, b); T = 100 \text{ K } (c);$$

$$1 - n_0 = 10^{12} \text{ cm}^{-2}; 2 - n_0 = 10^9 \text{ cm}^{-2}$$

Ще одним параметром, що визначає умови нуклеації поверхневої надгратки адатомів є інтенсивність лазерного опромінення (середня концентрація адатомів). Існує критичне значення концентрації адатомів N_c , менше за яке формування періодичної поверхневої структури є неможливим. На рис. 7.4 представлена залежність критичної температури T_c (критичного значення концентрації адатомів $1/N_c$) від напруженості електричного поля при різних значеннях концентрації електронів. Область під кривими – це область в якій відбувається формування періодичної структури адатомів. Електричне поле, напрям якого відповідає рис. 7.1, б, дозволяє зменшити критичне значення концентрації адатомів (інтенсивність лазерного опромінення) чи

збільшити температуру нижче якої відбувається формування поверхневої надгратки. Вплив електричного поля є більш суттєвим для сильно легованих напівпровідників.

В межах даної моделі розглядається початкова (лінійна) стадія формування поверхневої надгратки ($t < l/\lambda$). У результаті збільшення амплітуди деформації суттєвими стають нелінійні ефекти, що призводять до її насичення (амплітуда більше не зростає). У цьому випадку для розрахунку амплітуди в енергії пружної взаємодії необхідно до уваги брати ангармонічні доданки, або врахувати нелінійність в граничних умовах.

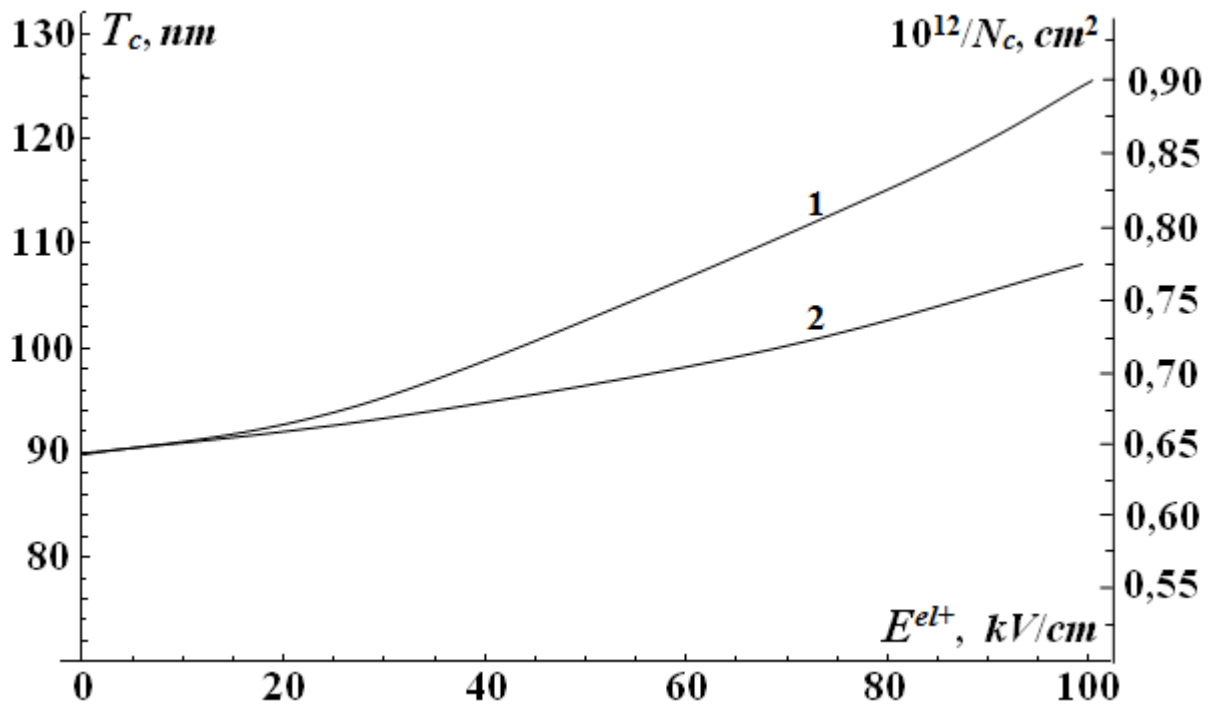


Рис. 7.4. Залежність критичної температури (критичної концентрації) від напруженості електричного поля при різних значеннях концентрації електронів: 1 – $n_0 = 10^{12} cm^{-2}$; 2 – $n_0 = 10^9 cm^{-2}$

7.4. Висновки до розділу 7

1. Розвинуто теорію нуклеації поверхневої надгратки адатомів у напівпровіднику GaAs під впливом лазерного опромінення при дії електричного поля, напрямленого перпендикулярно до напрямку поширення ПАХ. Запропонована теорія враховує взаємодію адатомів та електронів провідності із самоузгодженою ПАХ. Напівпровідник може бути як розташований у зовнішнє електричне поле, так і внутрішнє, створене, наприклад, гетеромежею. Поперечне до напрямку поширення ПАХ, електричне поле створює додаткову неоднорідну механічну напругу. І залежно від напрямку електричного поля можна збільшити чи зменшити деформаційні потоки адатомів.
2. Формування надгратки можливе, якщо середня концентрація адатомів перевищує деяке критичне значення (або температура є меншою за деяке критичне значення). Концентрація адатомів визначається інтенсивністю лазерного опромінення. Встановлено, що у напівпровіднику GaAs збільшення напруженості електричного поля залежно від напрямку призводить до збільшення або зменшення критичної температури (критичної концентрації адатомів), при якій можливе формування самоорганізованої наноструктури. Показано, що вплив електричного поля є більш суттєвим у сильнолегованих напівпровідниках, а також у напівпровідниках з великим значенням константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності та рухливості електронів. Найоптимальніший за цими параметрами є GaAs.
3. Показано, що у сильнолегованому напівпровіднику n-GaAs ($n_0 \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) збільшення напруженості електричного поля призводить до монотонної зміни (зменшення чи збільшення залежно від напрямку електричного поля) періоду самоорганізованих поверхневих наноструктур адатомів.
4. Встановлено, що вплив електричного поля на умови формування та період поверхневої надгратки не залежить від знаку деформаційного потенціалу адатомів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Войцеховский А.В., Коханенко А.П., Коротаев А.Г., Григорьев Д.В., Варавин В.С., Дворецкий С.А., Сидоров Ю.Г., Михайлов Н.Н. Облучение высокоэнергетическими электронами и γ - квантами эпитаксиальных пленок КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Прикладная физика. – 2003. – № 5. – С.99-101.
2. Бобиль А.В., Гуткин А.А., Брунков П.Н., Заморянская И.А., Яговкина М.А., Мусихин Ю.Г., Саксеев Д.А., Конников С.Г., Устинов В.М., Копьев П.С., Пунин В.Т., Илькаев Р.И., Алфёров Ж.И. Рентгенодифракционные и электронно-микроскопические исследования влияния γ - излучения на многослойные гетероструктуры AlGaAs/InGaAs/GaAs // ФТП. – 2006. – Т.40, № 6. – С.707-710.
3. Вилисова М.Д., Куницын А.Е., Лаврентьева Л.Г., Преображенский В.В., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Торопов С.Е., Чалдышев В.В. Легирование слоев GaAs кремнием в условиях низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии // ФТП. – 2002. – Т.14, № 11. – С.3157-3161.
4. Курганов А.Г., Фалько Г.Л., Федорченко А.М. Аналитический расчет распределения радиационных дефектов и примеси при предельных дозах ионного легирования // ФММ. – 1986. – Т.61, № 1. – С.16-20.
5. Войцеховский А.В., Коханенко А.П., Коротаев А.Г., Григорьев Д.В., Варавин В.С., Дворецкий С.А., Сидоров Ю.Г., Талипов Н.Х. Распределение профилей радиационных дефектов при ионной имплантации варизонных структур КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Прикладная физика. – 2003. – № 5. С.93-95.
6. Бабич В.М., Доценко Ю.П., Міщенко Л.А., Скороход М.Я. Роль легуючих та фонових домішок у формуванні дефектної структури

- і електрофізичних властивостей кисневмісних кристалів кремнію // Фізика і хімія твердого тіла. – 2002. – Т.3, № 3. – С.515-520.
7. Анисимова Л.Л., Гутаковский А.К., Ивонин И.В., Преображенский В.В., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Субач С.В. Образование дефектов в эпитаксиальных слоях GaAs и InGaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии при низких температурах // Журнал структурной химии. – 2004. – Т.45, приложение. – С.96-101.
 8. Бузынин Ю.Н., Гусев С.А., Дроздов Ю.Н., Мурель А.В. Пористый арсенид галлия с кластерами мышьяка // ЖТФ. – 2000. – Т.70, № 5. – С.128-129.
 9. Emel'yanov V.I., Panin I.M. A Hierarchy of the formation of nanometer clusters and periodic structures of laser-induced defects // Laser Physics. – 1996. – Vol.6, № 5. – P.971-978.
 10. Berezovska N., Dmitruk I., Kalyuzhnyy A., Dmytruk A., Blonskyi I. Self-organized structuring of the surface of a metal–semiconductor composite by femtosecond laser processing // Ukr. J. Phys. – 2018. – V. 63, №5 – P 406 – 412.
 11. Medvid A., Onufrijevs P., Jarimaviciute-Gudaitiene R., Dauksta E., Prosycevas I. Formation mechanisms of nano and microcones by laser radiation on surfaces of Si, Ge, and SiGe crystals // Nanoscale Research Letters. – 2013. – V.8. – P. 264 :1 – 8.
 12. Vlasenko A.I., Baidullaeva A., Veleschuk V.P., Mozol P.E., Boiko N.I., Litvin O.S. On the formation of nanostructures on a CdTe surface, stimulated by surface acoustic waves under nanosecond laser irradiation // Semiconductors. – 2015. – V. 49, №2. – P . 229 – 233.
 13. Gorb A., Korotchenkov O., Kuryliuk V., Medvid A., Nadtochiy A., Podolian A. Increase of photoelectric response of ge nanocones formed on SiGe by laser radiation // Advanced Materials Research. – 2015. – V. 1117. – P. 23 – 25.
 14. Höhm S., Rohloff M., Rosenfeld A., Krüger J., Bonse J. Formation of laser-induced periodic surface structures on fused silica upon two-color

- double-pulse irradiation // *Applied Physics A*. – 2013. V. 103. – P. 254101.
15. Wu J., Yang Y., Gao H., Qi Y., Zhang J., Qiao Z., Ren W. Electric field effect of GaAs monolayer from first principles // *AIP Advances*. – 2017. – V. 7. – P. 035218.
 16. Bonse J., Höhm S., Kirner S.V., Rosenfeld A., Krüger J. Laser-induced periodic surface structures – a scientific evergreen. // *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics*. – 2017. – V. 23. – P. 9000615.
 17. Kazanskiy N.L., Murzin S.P., Osetrov Ye.L., Tregub V.I. Synthesis of nanoporous structures in metallic materials under laser action // *Optics and Lasers in Engineering*. – 2011. – V. 49. P. 1264 – 1267.
 18. Kissi E.O., Bellouard Y. Self-organized nanostructures forming under high-repetition rate femtosecond laser bulk-heating of fused silica // *Optics Express*. – 2018. – V. 26. – P. 14024 – 14037.
 19. Capello L. Structural investigation of silicon after ion-implantation using combined x-ray scattering method. – Lyon: Université Claude Bernard, 2005 – 143 p.
 20. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. Temperature regimes of formation of nanometer periodic structure of adsorbed atoms in GaAs semiconductors under the action of laser irradiation // *Condensed Matter Physics*. – 2015. – V. 18. – № 4. – P. 43801: 1 – 8.
 21. Emel'yanov V.I., Baidullaeva A., Vlasenko A.I., Mozol P.E. Theory of formation of an ensemble of nanoclusters on the surface of CdTe crystals irradiated by a laser pulse // *Quantum Electronics*. – 2008. – V. 38. – P. 245 – 250.
 22. Peleshchak R.M., Lazurchak I.I., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O., Zegrya G.G. Role of acoustoelectric interaction in the formation of nanoscale periodic structures of adsorbed atoms // *Semiconductors*. – 2016. – V. 50. – № 3. – P. 314 – 319.
 23. Chepak-Gizbrekht M., Knyazeva A. Stress evaluation in the surface layer at the condition of particle beam // *Advanced Materials Research*. – 2014. – V 880. – P 259 – 264.

24. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. Formation of periodic structures under the influence of an acoustic wave in semiconductors with a two-component defect subsystem // *Ukrainian Journal of Physics.* – 2016. – V. 61. – № 8. – P. 741 – 746.
25. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. The influence of ultrasound on formation of self-organized uniform nanoclusters // *Journal of nano- and electronic physics.* – 2016. – V. 8. – № 2. – P. 02014 (6 pp.)
26. Peleshchak R.M., Guba S.K., Kuzyk O.V., Kurilo I.V., Dan'kiv O.O. Effect of Bi isovalent dopants on the formation of homogeneous coherently strained InAs quantum dots in GaAs matrices // *Semiconductors.* – 2013. – V. 47. – № 3. – P. 349 – 353.
27. Пелешчак Р.М., Кузик О.В. Самоузгоджений деформаційно-дифузійний просторовий перерозподіл дефектів у напівпровіднику під дією електричного поля // *УФЖ.* – 2009. – Т.54, № 7. – С.703-707.
28. Пелешчак Р.М., Кузик О.В., Даньків О.О. Вплив деформаційних ефектів на електричні властивості структури метал – напівпровідник – легований напівпровідник // *УФЖ.* – 2010. – Т.55, №4. – С.437-442.
29. Lawniczka-Jablonska K., Wolska A., Klepka M.T. Structural and magnetic properties of nanoclusters formed in III-V semiconductors // *J. Physics: Conference Series.* – 2016. – V. 712. – P. 012100 (6 p.).
30. Yang W., Zhang B., Ding N., Ding W., Wang L., Yu M., Zhang Q. Fast synthesize ZnO quantum dots via ultrasonic method // *Ultrasonics Sonochemistry.* – 2016. – V. 30. – P. 103 – 112.
31. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. Non-linear model of impurity diffusion in nanoporous materials upon ultrasonic treatment // *Condensed Matter Physics.* – 2014. – V. 17. – № 2. – P. 23601: 1 – 8.
32. Пелешчак Р.М., Кузик О.В., Даньків О.О. Вплив ультразвуку на енергетичний спектр електрона та дірки у гетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs // *Журнал нано- та електронної фізики.* – 2016. – Т. 8. – № 4. – С. 04064 (4 pp.).

33. Пелешчак Р.М., Даньків О.О., Кузик О.В. Модуляція напрямку випромінювання гетеролазера з квантовими точками InAs під впливом акустичної хвилі // Український фізичний журнал. – 2012. – Т. 57. – № 1. – С. 71 – 75.
34. Ledentsov N.N., Ustinov V.M., Shchukin V.A., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Bimberg D. Quantum dot heterostructures: Fabrication, properties, lasers // Semiconductors. – 1998. – V. 32. – P 343 – 365.
35. Taylor C., Marega E., Stach E.A., Salamo G., Hussey L., Munoz M., Malshe A. Directed self-assembly of quantum structures by nanomechanical stamping using probe tips // Nanotechnology. – 2008. – V. 19. – P. 015301.
36. Kristukat C., Goci A.R., Putschke K., Bimberg D., Thomsen C. Dependence of the band-gap pressure coefficients of self-assembled InAs/GaAs quantum dots on the quantum dot size // Phys. stat. sol. (b). – 2007. – V. 244. – P. 53 – 58.
37. Balaban O.V., Grygorchak I.I., Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. The ultrasonic modification of thermodynamic and kinetic regularity of lithium intercalation in talc // Progress in Natural Science: Materials International. – 2014. – V. 24. – № 4. – P. 397 – 404.
38. Yazji S., Zardo I., Soini M., Postorino P. Local modification of GaAs nanowires induced by laser heating // Nanotechnology. – 2011. – V. 22. – P. 325701 (5 p.).
39. Lu L., Shi Y., Xu Ch., Xu G., Wang J., Xu B. The influence of pulse width and energy on temperature field in metal irradiated by ultrashort-pulsed laser // Physics Procedia. – 2012. – V. 32. – P. 39 – 47.
40. Mansoor S.B., Yilbas B.S. Laser short-pulse heating: influence of spatial distribution of absorption coefficient on temperature field in silicon film // Journal of Laser Micro/Nanoengineering. – 2012. – V. 7. – P. 176 – 188.
41. Di Paola M., Failla G., Zingales M. The mechanically-based approach to 3D non-local linear elasticity theory: Long-range central interactions

- // International Journal of Solids and Structures. – 2010. – V. 47. – P. 2347 – 2358.
42. Kissinger G., Pizzini S. Silicon, Germanium, and Their Alloys: Growth, Defects, Impurities, and nanocrystals. – Boca Raton.: CRS Press Taylor and Francis Group, 2014. – 431 p.
 43. Madelung O., Rössler U., Schulz M. Springer Materials. Germanium (Ge), lattice parameter, thermal expansion, https://materials.springer.com/lb/docs/sm_lbs_978-3-540-31356-4_496.
 44. Madelung O., Rössler U., Schulz M. Springer Materials. Germanium (Ge) elastic moduli, https://link.springer.com/chapter/10.1007%2F10551045_233.
 45. Пастур Л.А., Фельдман Э.П. Об упругих деформациях, возникающих при эпитаксиальном росте // ФТТ. – 1972. – Т.14, № 9. – С.2689-2692.
 46. Борд Б.Г., Палатник Л.С., Федоренко А.И., Фельдман Э.П. Упругие напряжения и деформации у границы раздела эпитаксиального бикристалла β -Co – Cu // ФТТ. – 1972. – Т.14, № 11. – С.3157-3161.
 47. Вилисова М.Д., Ивонин И.В., Лаврентьева Л.Г., Субач С.В., Якубеня М.П., Преображенский В.В., Путято М.А., Семягин Б.Р., Берт Н.А., Мусихин Ю.Г., Чалдышев В.В. Структура и свойства слоев InGaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии при низкой температуре // ФТП. – 1999. – Т.33, № 8. – С.900-905.
 48. Титов А.И. Роль механических напряжений при легировании материалов с помощью ионных пучков / Титов А.И. – М.: ИАЭ АН СССР, 1983. – 16 с. – (Препр./ АН СССР. ИАЭ; 3774/11).
 49. Титов А.И. Профили распределения внедренной примеси при больших дозах имплантационного легирования // ЖТФ. – 1979. – Т.49, № 4. – С.844-849.

50. Макарец Н.В., Фалько Г.Л., Федорченко А.М. Распыление поверхности мишени и радиационно-стимулированная диффузия примеси // Поверхность. – 1984. – № 5. – С.29-34.
51. Фалько Г.Л., Шпирко С.Г. Модель деформацийного перерозподілу і стаціонарні профілі концентрації імплантованої домішки // УФЖ. – 1995. – Т.40, № 10. – С.1115-1118.
52. Банишев А.Ф., Голубев В.С., Кремнев А.Ю. Иницируемая лазерным воздействием аномальная диффузия кислорода в обогащенном дефектами поверхностном слое кремния // Письма в ЖТФ. – 2000. – Т.26, № 2. – С.8-12.
53. Kyutt R.N., Petrashen P.V., Sorokin L.M. Strain profiles in ion-doped silicon obtained from X-ray rocking curves // Phys. Stat. Sol. (a). – 1980. – Vol.60, № 2. – P.381-389.
54. Larson B.C., Barhorst J.F. X-ray study of lattice strain in B-implanted laser annealed Si // J. Appl. Phys. – 1980. – Vol.51, № 6. – P.3181-3185.
55. Kin Man Yu, Kaminska M., and Liliental-Weber Z. Characterization of GaAs layers grown by low temperature molecular beam epitaxy using ion beam techniques // J. Appl. Phys. – 1992. – Vol. 72, № 7. – P.2850-2856.
56. Михайловский В.В., Расселл К.С., Сугаков В.И. Образование сверхрешеток плотности дефектов в бинарных соединениях при ядерном облучении // ФТТ. – 2000. – Т.42, № 3. – С.471-477.
57. Винценц С.В., Зотеев А.В., Плотников Г.С. О порогах возникновения неупругих деформаций в поверхностных слоях Si и GaAs при многократном импульсном лазерном облучении // ФТП. – 2002. – Т.36, № 8. – С.902-906.
58. Винценц С.В., Зайцева А.В., Плотников Г.С. Самоорганизация лазерноиндуцированных точечных дефектов на начальных стадиях неупругих фотодеформаций германия // ФТП. – 2003. – Т.37, № 2. – С.134-141.

59. Емельянов В.И. Самоорганизация упорядоченных дефектно-деформационных микро- и наноструктур на поверхности твердых тел под действием лазерного излучения // Квантовая электроника. – 1999. – Т.28, № 1. – С.2-18.
60. Мирзоев Ф.Х. Деформационная неустойчивость и генерация поверхностных упорядоченных структур при лазерном воздействии // Квантовая электроника. – 1996. – Т.23, № 9. – С.827-830.
61. Emel'yanov V.I. Generation-diffusion-deformational instabilities and formation of ordered defect structures on surfaces of solids under the action of strong laser beams // Laser Physics. – 1992. – Vol.2, № 4. – P.389-466.
62. Walgraef D., Ghoniem N.M., Lauzeral J. Deformation patterns in thin films under uniform laser irradiation // Phys. Rev. B – 1997. – Vol.56, № 23. – P.15361-15377.
63. Lauzeral J., Walgraef D., Ghoniem N.M. Rose deformation patterns in thin films irradiated by focused laser beams // Phys. Rev. Lett. – 1997. – Vol.79, № 14. – P.2706-2709.
64. Герасименко Н.Н. Наноразмерные структуры в имплантированных полупроводниках // Рос. хим. ж. – 2002. – Т.46, № 5. – С.30-41.
65. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. – М.: Мир, 1963. – 247 с.
66. Конобеевский С.Т. Действие облучения на материалы. – М.: Атомиздат, 1967. – 401 с.
67. Баграташвили В.Н., Банишев А.Ф., Гнедой С.А., Емельянов В.И., Семиногов В.Н., Мерзляков К.С., Панченко В.Я., Жерихин А.Н. Эффект образования периодических структур пор при лазерном осаждении металлических пленок // Поверхность. – 1991. – № 2. – С.115-119.
68. Bagratashvili V.N., Banishev A.F., Gnedoy S.A., Emel'yanov V.I., Jerikhin A.N., Merzlyakov K.S., Panchenko V.Ya., Seminogov V.N. Formation of periodic ring structures of relief and voids under laser

- vapor deposition of metallic films // Appl. Phys. A. – 1991. – Vol.52, № 6. – P.438-444.
69. Емельянов В.И., Мирзоев Ф.Х., Шелепин Л.А. О механизмах образования упорядоченных структур дефектов при воздействии концентрированных потоков энергии // Квантовая Электроника. – 1994. – Т.21, № 8. – С.769-772.
 70. Emel'yanov V.I., Shlykov Yu.G. The Entropy barrier and the rate of diffusion-strain nucleation of clusters of point defects in laser-irradiated solids // Laser Physics. – 1996. – Vol.6, № 4. – P.713-720.
 71. Емельянов В.И., Каримов К.М. Дефектно-деформационная модель образования поверхностных шероховатостей при лазерном облучении полупроводников и металлов // Письма в ЖТФ. – 2005. – Т.31, № 6. – С.84-88.
 72. Емельянов В.И., Еремин К.И., Сумбатов А.А. Дефектно-деформационная нанометровая самоорганизация при лазерной перекристаллизации тонких аморфных пленок на субстратах // Квантовая электроника. – 2002. – Т.32, № 9. – С.753-755.
 73. Огибалов П.М. Изгиб, устойчивость и колебания пластин. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1958. – 389с.
 74. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. – М.: Наука, 1965. – 203с.
 75. Емельянов В.И. Экранировка поля деформации в твердом теле точечными дефектами // ФТТ. – 2001. – Т.43, № 4. – С.637-638.
 76. Емельянов В.И., Панин И.М. Образование нанометровых упорядоченных дефектно-деформационных структур в твердых телах при воздействии на них потоков энергии // ФТТ. – 1997. – Т.39, № 11. – С.2029-2035.
 77. Мирзоев Ф.Х., Панченко В.Я., Шелепин Л.А. Лазерное управление процессами в твердом теле // УФН. – 1996. – Т.166, № 1. – С.3-32.
 78. Sikka V.K., Moteff J. Damage in neutron-irradiated molybdenum (I). Characterization of as-irradiated microstructure // J. Nucl. Mat. – 1974. – Vol.54, № 2. – P.325-345.

79. Chadderton L.T., Johnson E. and Wohlenberg T. Observations of a regular void array in natural fluorite irradiated with 100 keV electrons // *Physica Scripta*. – 1976. – Vol.13, № 2. – P.127-128.
80. Байдуллаева А., Булах М.Б., Власенко А.И., Ломовцев А.В., Мозоль П.Е. Динамика развития поверхностных структур в кристаллах р-CdTe при облучении импульсным лазерным излучением // *ФТП*. – 2004. – Т.38, № 1. – С.26-29.
81. Гигантское комбинационное рассеяние. Под ред. Ченга Р., Фуртака Т. – М.: Мир, 1984. – 408 с.
82. Emel'yanov V.I. Defect–deformational surface roughening and melting and giant enhancement of optical processes at surface of solids // *Laser Physics*. – 1998. – Vol.8, № 4. – P.937-940.
83. Emel'yanov V.I. Ignition and propagation of the amorphization wave in semiconductors under conditions of intense generation of electron–hole pairs by short laser pulses // *Laser Physics*. – 1996. – Vol.6, № 6. – P.1132-1141.
84. Емельянов В.И., Рогачева А.В. Зажигание и распространение уединенной волны образования точечных дефектов при интенсивной лазерной генерации электрон-дырочных пар в полупроводниках и диэлектриках // *Квантовая электроника*. – 1998. – Т.25, № 11. – С.1017-1022.
85. Emel'yanov V.I., Rogacheva A.V. Solitary wave of point defect formation and wave of impact ionization propagated under intensive generation of electron-hole pairs in semiconductors and dielectrics // *Proc. SPIE*. – 1999. – Vol.3734. – P.111-121.
86. Сугаков В.И. Фазовые переходы в системах нестабильных частиц // *ФТТ*. – 1998. – Т.40, № 4. – С.741-745.
87. Берзин А.А., Морозов А.И., Сигов А.С. Подвижность кластеров в системе легких примесей внедрения // *ФТТ*. – 2000. – Т.42, № 4. – С.676-678.
88. Selishchev P.A. Accumulation dynamics of oxygen clusters in silicon and formation of their nonhomogeneous distribution // *Semiconductor*

- Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2000. – Vol.3, N 1. – P. 19-21.
89. Rahbi R., Pajot B., Chevallier J., Marbeuf A., Logan R.C., Gavand M. Hydrogen diffusion and acceptor passivation in *p*-type GaAs // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.73, № 4. – P.1723-1731.
 90. Omeljanovsky E.M., Pakhomov A.V., Polyakov A.Y. Hydrogen passivation of donors and acceptors in InP // Semicond. Sci. Technol. – 1989. – Vol.4, № 11. – P.947-950.
 91. Chang Y.-L., Tan I.-H., Hu E., Merz J., Emiliani V., Frova A. Study of hydrogenation on near-surface strained and unstrained quantum wells// J. Appl. Phys. – 1994. – Vol.75, № 6. – P.3040-3044.
 92. Бумай Ю.А., Явич Б.С., Синицин М.А., Ульяшин А.Г., Шлопак Н.В., Воронин В.Ф. Гидрирование гетероструктур AlGaAs/GaAs со слабонапряженными квантовыми ямами // ФТП. – 1994. – Т.28, №2. – С.276-279.
 93. Lord S.M., Roos G., Harris J.S., Johnson N.M. Hydrogen passivation of nonradiative defects in InGaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.73, № 2. – P.740-748.
 94. Chen Y.C., Singh J., Bhattacharya P.K. Suppression of defect propagation in semiconductors by pseudomorphic layers // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.74, № 6. – P.3800-3804.
 95. Карпович И.А., Аншон А.В., Филатов Д.О. Образование и пассивация дефектов в гетероструктурах с напряженными квантовыми ямами GaAs/InGaAs при обработке в водородной плазме // ФТП. – 1998. – Т.32, № 9. – С.1089-1093.
 96. Куликов Г.С., Малкович Р. Ш. Взаимодействие атомной и электронно-дырочной подсистем и роль точечных дефектов при диффузии в полупроводниках // ФТП. – 1995. – Т.29, № 5. – С.937-944.
 97. Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках. – Москва.: Физматгиз, 1961. – 462с.

98. Болтакс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. – Ленинград.: Наука, 1972. – 310с.
99. Atomic diffusion in semiconductors, ed. by Shaw D. – London, New York: Plenum Press, 1973. – 685 p.
100. Zimmermann H., Gosele U., Tan T.Y. Modeling of zinc-indiffusion-induced disordering of GaAs/AlAs superlattices // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.73, № 1. – P.150-157.
101. Ванина Е.А., Рокосей В.А. Моделирование образования упорядоченной структуры радиационных дефектов // Известия ВУЗов. Физика. – Томск. – 2006. – № 8. – С.92-95.
102. Vanina E.A., Rokosei V.A. Modelling of the formation of an ordered structure of radiation-induced defects // Russian Physics Journal. – 2006. – Vol.49, № 8. – P.898-901.
103. Баранов А.Ф., Ванина Е.А., Рокосей В.А. Моделирование упорядоченной структуры скоплений радиационных дефектов // Информатика и системы управления. – 2006. – № 1(11). – С.27-31.
104. Рокосей В.А., Ванина Е.А. Расчет параметров упорядоченной структуры скоплений дефектов // Вестник Амурского Государственного университета. – 2006. – № 35. – С.22-24.
105. Дистлер Г.И., Лебедева В.Н., Москвин В.В. Исследование центров окраски щелочно-галоидных кристаллов на электронно-микроскопическом уровне // Кристаллография. – 1969. – Т.14, № 4. – С.664-671.
106. Дистлер Г.И., Власов В.П. Избирательная кристаллизация на элементах электрической структуры поверхности кристаллов LiF // ФТТ. – 1969. – Т.11, № 8. – С.2226-2229.
107. Дистлер Г.И., Москвин В.В. Решетка точечных дефектов в щелочно-галоидных кристаллах и ее влияние на активность и хрупкое разрушение этих кристаллов // ФТТ. – 1978. – Т.20, № 4. – С.1252-1254.
108. Лантратов В.М., Калюжный Н.А., Минтаиров С.А., Тимошина Н.Х., Шварц М.З., Андреев В.М. Высокоэффективные

- двухпериодные GaInP/GaAs солнечные элементы, полученные методом МОС-гидридной эпитаксии // ФТП. – 2007. – Т.41, № 6. – С.751-755.
109. Ачоян А.Ш., Есаян А.Э., Казарян Э.М., Петросян С.Г. Двумерный р-п-переход в равновесии // ФТП. – 2002. – Т.36, № 8. – С. 969-973.
110. Войцеховский А.В., Григорьев Д.В., Коротаев А.Г., Коханенко А.П. Особенности определения электрофизических параметров варизонных структур КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Изв. вузов. Физика. – 2004. – № 7. – С.70-71.
111. Войцеховский А.В., Григорьев Д.В., Коротаев А.Г., Коханенко А.П., Леонтьев Д.В., Кульчицкий Н.А. Профили распределения дефектов в эпитаксиальных пленках $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии, при ионной имплантации аргона и азота // Изв. вузов. Материалы электронной техники. – 2004. – № 2. – С.60-65.
112. Зубков В.И. Диагностика гетероструктур с квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ методом вольт-фарадных характеристик: разрывы зон, уровни квантования, волновые функции // ФТП. – 2007. – Т.41, № 3. – С.331-337.
113. Зубков В.И. Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона // ФТП. – 2006. – Т.40, № 10. – С.331-337.
114. Kroemer H., Chien Wu-Yi, Harris J.S., Edwall D.D. Measurement of isotype heterojunction barriers by C-V profiling // Appl. Phys. Lett. – 1980. – Vol.36, № 4. – P.295-297.
115. BenDaniel D.J., Duke C.D. Space-charge effects on electron tunneling // Phys. Rev. – 1966. – Vol.152, № 2. – P.683-692.
116. Brounkov P.N., Benyattou T., Guillot G. Simulation of the capacitance–voltage characteristics of a single-quantum-well structure

- based on the self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol.80, № 2. – P.864-871.
117. Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А. Физика низкоразмерных систем. – СПб.: Наука, 2001. – 155 с.
 118. Blood P., Orton J.W. The electrical characterization of semiconductors: majority carriers and electron states. – London: Academic Press, 1992. – 768 p.
 119. Blonskiy I.V., Lev B.I., Valakh M.Ya. Multimodal size distribution of Si nanoclusters in SiO₂ as manifestation of interaction in the space of sizes // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 1998. – Vol.1, N 1. – P. 57-60.
 120. Стасюк І.В., Пелещак Р.М. Заповнення електронних станів і деформація ґратки металу в околі межі поділу областей з різними механічними напруженостями // УФЖ. – 1991. – Т.36, № 11. – С.1744-1749.
 121. Пелещак Р.М. Влияние эффекта рассеяния на электронную плотность и деформацию решетки в окрестности границы областей полупроводника с различными механическими напряжениями / Пелещак Р.М., Стасюк И.В. – К.: ИТФ АН УССР, 1990.– 20с. – (Преп./АН УССР. ИТФ; ИТФ-90-14Р).
 122. Стасюк І.В., Пелещак Р.М. Деформаційні і електронні стани напівпровідника поблизу межі поділу областей з різними механічними напруженостями // УФЖ. – 1994. – Т.39, № 7. – С.856-861.
 123. Пелещак Р.М., Стасюк І.В. Вплив електронного заповнення зони провідності на зміну параметра ґратки кристала з точковими дефектами // УФЖ. – 1999. – Т.44, № 8. – С.997-1002.
 124. Lukiyanets B.A., Peleshchak R.M. Magnetodeformation effects in a crystal lattice // Condensed Matter Physics. – 1999. – Vol.2, № 1(17). – P.89-92.
 125. Varma C.M. Mixed-valence compounds // Rev. Mod. Phys. – 1976. – Vol.48, № 2, part 1. – P.219-238.

126. Penney T., Melcher R.L. Electronic configuration and lattice collapse in Sm compounds // J. Physique Colloq. – 1976. – Vol.37, № 10. – P.C4-275-C4-282.
127. Entel P., Grewe N. Mixed valencies: structure of phase diagrams, lattice properties and consequences of electron hole symmetry // Z. Phys. – 1979. – Vol.B34, № 3. – P.229-241.
128. Григорчук Р.А., Стасюк И.В. Электрон-деформационное взаимодействие и сжатие решетки в кристаллах, описываемых моделью Хаббарда // УФЖ. – 1980. – Т.25, № 3. – С.404-410.
129. Пелещак Р.М., Лукиянец Б.А. Электронное перераспределение в окрестности ядра линейной дислокации // Письма в журнал технической физики. – 1998. – Vol.24, № 2. – С. 37-41.
130. Longini R.L., Greene R.F. Ionization interaction between impurities in semiconductors and insulators // Phys. Rev. – 1956. – Vol.102, № 4. – P.992-999.
131. Солдатенков Ф.Ю., Данильченко В.Г., Корольков В.И. Управлением временем жизни носителей заряда в высоковольтных $p-i-n$ -диодах на основе гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ // ФТП. – 2007. – Т.41, № 2. – С.217-220.
132. Берман Л.С., Данильченко В.Г., Корольков В.И., Солдатенков Ф.Ю. Глубокоуровневые центры в нелегированных слоях $p\text{-GaAs}$, выращенных методом жидкофазной эпитаксии // ФТП. – 2000. – Т.34, № 5. – С.558-561.
133. Pease R.L. Total ionizing dose effects in bipolar devices and circuits // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2003. – Vol.50, № 3. – P.539-551.
134. White B.D., Bataiev M., Goss S.H., Hu X., Karmarkar A., Fleetwood D.M., Schrimpf R.D., Schaff W.J., Brillson L.J. Electrical, spectral, and chemical properties of 1.8 MeV proton irradiated AlGaIn/GaN HEMT structures as a function of proton fluence // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2003. – Vol.50, № 6. – P.1934-1941.

135. Virt I.S., Gorbunov V.V. Effect of thermal neutron irradiation effect on the electrophysical and photoelectrical properties of $\text{Hg}_{0,8}\text{Cd}_{0,2}\text{Te}$ // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. — 2000. — Vol.3, N 1. — P. 35-38.
136. Борковская О.Ю., Дмитрук Н.Л., Ермолович И.Б., Конакова Р.В., Миленин В.В. Влияние γ -облучения ^{60}Co на формирование омических контактов в структурах металл-GaAs ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) // ЖТФ. — 2004. — Т.74, № 3. — С.44-49.
137. Краак В., Савин А.М., Минина Н.Я., Ильевский А.А., Полянский А.В. Двумерные электроны на гетерогранице n-GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при одноосном сжатии // ЖЭТФ. — 2006. — Т.130, № 5(11). — С.895-901.
138. Dybala F., Adamiec P., Bercha A., Bohdan R., Trzeciakowski W. Wavelength tuning of laser diodes using hydrostatic pressure // Proc. SPIE. — 2003. — Vol.4989. Optical Devices for Fiber Communication IV. — P.181-188.
139. Жуков А.Е., Егоров А.Ю., Устинов В.М., Цацульников А.Ф., Максимов М.В., Фалеев Н.Н., Копьев П.С. Влияние рассогласования параметров решеток на структурные, оптические и транспортные свойства слоев InGaAs, выращиваемых методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках InP (100) // ФТП. — 1997. — Т.31, № 1. — С.19-22.
140. Chris G. van de Walle. Band Lineups and Deformation Potentials in the Model–Solid Theory // Phys. Rev. B. — 1989. — Vol.39, № 3. — P.1871-1883.
141. Ормонт Б.Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. — М.: Высшая школа, 1982. — 528 с.
142. Домашевская Э.П., Середин П.В., Долгополова Э.А., Занин И.Е., Арсентьев И.Н., Винокуров Д.А., Станкевич А.Л., Тарасов И.С. Закон Вегарда и сверхструктурная фаза в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (100) // ФТП. — 2005. — Т.39, № 3. — С.354-360.

143. Пелешак Р.М., Кузик О.В. Виникнення $n-n^+$ -переходів у кристалах з самоорганізованими дефектно-деформаційними структурами // УФЖ. – 2006. – Т.51, № 9. – С.888-893.
144. Salokatve A., Hovinen M. The effects of strain on morphology and structural properties of InGaAs/InP(001) grown by molecular beam epitaxy // J. Appl. Phys. – 1990. – Vol.67, № 7. – P.3378-3381.
145. Зубарев Д.Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике // УФН. – 1960. – Т.71, № 1. – С.75-115.
146. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. – М.: Мир, 1978. – 615 с.
147. Джафаров Т.Д. Дефекты и диффузия в эпитаксиальных структурах. – Ленинград.: Наука, 1978. – 208 с.
148. Кладько В.П., Даценко Л.І., Максименко З.В., Кладько І.В. Структурні властивості імплантованих шарів арсеніду галію в полях пружних деформацій з урахуванням напружено-деформованого стану // УФЖ. – 2001. – Т.46, № 7. – С.749-751.
149. Черняев А.В. Метод ионной имплантации в технологии приборов и интегральных схем на арсениде галлия. – М.: Радио и связь, 1990. – 88 с.
150. Zinovyev V.A., Dvurechenskii A.V., Kuchinskaya P.A., Armbrister V.A., Teys S.A., Shklyayev A.A., Mudryi A.V., Semiconductors, 2015, 49, 149; doi: 10.1134/S1063782615020256
151. Ipatova I.P., Malyshkin V.G., Maradudin A.A. Kinetic instability of semiconductor alloy growth // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 57. – P. 12968.
152. Yamada I., Matsuo J., Tojoda N. Cluster ion beam process technology / Phys. Research B. – 2003. – V. 206. – P. 820 – 829.
153. Boryakov A.V., Nikolitchiev D.E., Tetelbaum D.I., Belov A.I., Ershov A.V., Mikhaylov A.N. Chemical and phase compositions of silicon oxide films with nanocrystals prepared by carbon ion implantation // Phys. of the Solid State. – 2012. – V. 54. – P. 394 – 403.
154. Пелешак Р.М., Кузик О.В., Даньків О.О. Дифузійно-деформаційна теорія формування самоорганізованих нанокластерів

- імплантованих домішок // Журнал фізичних досліджень. – 2013. – Т. 17. – № 2. – С. 2601-1 – 2601-6.
155. Emel'yanov V.I. Defect-induced instability of the surface layer involving static coupled lamb and rayleigh waves as a universal mechanism of the formation of an ensemble of nanodot nucleation centers // Laser Phys. – 2008. – V. 18. – P. 1435 – 1446.
156. Zeng Y., Tao B., Chen J., Yin Zh. Study on external electric field-induced structural changes in the initial growth of pentacene on amorphous SiO₂ // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2016. – V. 49. – P. 195308 (7 p.).
157. Tang C., Liao X., Zhong W., Yu H., Liu Zh. Electric field assisted growth and field emission properties of thermally oxidized CuO nanowires // RSC Advances. – 2017. V. 7. – P. 6439 – 6446.
158. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. The model of nucleation of nanometer structure of the adatoms under the action of comprehensive pressure // Journal of nano- and electronic physics. – 2018. – V. 10. – № 1. – P. 01014 (6 p.).
159. Yazji S., Zardo I., Soini M., Postorino P. Local modification of GaAs nanowires induced by laser heating // Nanotechnology. – 2011. – V. 22. – P. 325701 (5 p.).

