

## Вплив ультразвуку на формування самоорганізованих однорідних нанокластерів

Р.М. Пелещак, О.В. Кузик, О.О. Даньків\*

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
вул. Івана Франка, 24, 82100 Дрогобич, Україна

(Одержано 29.01.2016, у відредагованій формі – 12.06.2016, опубліковано online 21.06.2016)

Розвинуто нелінійну дифузійно-деформаційну теорію самоорганізації нанокластерів точкових дефектів у напівпровіднику, що піддається впливу ультразвуку, яка враховує взаємодію дефектів між собою та з атомами матриці через пружне поле, створене точковими дефектами та акустичною хвилею. У межах даної теорії досліджено вплив ультразвуку на умови формування сферичних нанокластерів та їх радіус. Визначено розмір нанокластера залежно від середньої концентрації дефектів та амплітуди акустичної хвилі. Встановлено, що ультразвукова обробка напівпровідника в процесі формування масиву нанокластерів призводить до зменшення дисперсії їх розмірів.

**Ключові слова:** Самоорганізований нанокластер, Ультразвук, Деформація, Точкові дефекти.

DOI: [10.21272/jnep.8\(2\).02014](https://doi.org/10.21272/jnep.8(2).02014)

PACS numbers: 61.46. – w, 43.35. + d

### 1. ВСТУП

Останнім часом у мікроелектронних приладах знайшли широке застосування напівпровідникові структури із самоорганізованими нанокластерами [1-4], отримані різними методами: молекулярно-променевої епітаксії [1], іонної імплантації [2, 3], лазерного опромінення [4] та іншими.

Унікальні властивості напівпровідникових структур з нанокластерами (квантовими точками) проявляються лише у випадку, якщо сформовані кластери однорідні за формою та розмірами (з мінімальною дисперсією розмірів), а масив нанокластерів володіє високою густиною (порядку  $10^{11} \text{ см}^{-2}$ ) [5-7]. Тому важливою задачею при отриманні напівпровідникових структур із самоорганізованими нанокластерами є керування їх морфологією: середнім розміром, густиною, однорідністю та ін.

На умови формування самоорганізованих нанокластерів суттєво впливають деформаційні ефекти, обумовлені невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів [6], ненульовим об'ємом власних дефектів та домішок [3, 7], акустоелектронною взаємодією [8-10], а також зовнішніми чинниками, наприклад, впливом електричного, магнітного поля чи ультразвукової хвилі [11].

Наявність ультразвукової хвилі, по-перше, змінює концентрацію точкових дефектів у напівпровідниковій структурі, а по-друге, за рахунок градієнта деформації створює додаткові потоки адсорбованих атомів та дефектів [3, 9, 12, 13], які при виборі відповідних параметрів призведуть до їх більшої локалізації в квантовій точці (КТ). Тому обробка ультразвуком напівпровідникової структури і оптимальний вибір інтенсивності та частоти ультразвукової хвилі повинні сприяти формуванню масиву однорідних за розмірами самоорганізованих КТ.

У даній роботі побудовано модель формування однорідних самоорганізованих нанокластерів у напівпровіднику, що піддається впливу ультразвуку.

### 2. МОДЕЛЬ

#### 2.1 Самоузгоджений деформаційно-дифузійний перерозподіл точкових дефектів у напівпровіднику, що піддається впливу ультразвуку

Розглянемо сферично-симетричну дефектно-кристалічну систему, в центрі якої ( $r = 0$ ) внаслідок нелінійної взаємодії дефектів через пружне поле формується кластер цих дефектів. Виділимо сферичну область кристалу радіусом  $R_0 \gg ld$ , де  $ld$  – середня довжина вільного пробігу дефекту.

Потенціальна енергія пружної взаємодії дефекту може бути представлена у вигляді [3]:

$$U_i = U_{dd}^{\text{int}} + U_{da}^{\text{int}}. \quad (1)$$

Тут перший доданок  $U_{dd}^{\text{int}} = -\frac{2}{3} K \frac{1-2\nu}{1-\nu} N \Delta \Omega_d^2$  визначає енергію взаємодії дефектів між собою, а другий  $U_{da}^{\text{int}} = -K \varepsilon(r) \Delta \Omega_d - K r_{da}^2 \Delta \Omega_d \partial^2 \varepsilon(r) / \partial r^2$  – дефектів з атомами кристалічної матриці, де  $K$  – модуль всебічного стиску;  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона;  $N(r)$  – концентрація дефектів;  $\Delta \Omega_d$  – зміна об'єму кристалу одним дефектом;  $\varepsilon_{rr}(r) = \varepsilon(r)$  – радіальна компонента тензора деформації;  $r_{da}$  – характеристична відстань взаємодії між дефектами та атомами матриці [3].

Пружне поле, що виникає в дефектному кристалі, діє на дефект із силою  $\mathbf{F} = -\mathbf{grad} U_i$ . Під дією цієї сили дефекти у пружному полі отримують швидкість [3]:

$$\mathbf{v} = \mu \mathbf{F} = \frac{DK}{k_B T} \mathbf{grad} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N(r) \Delta \Omega_d^2 + \varepsilon(r) \Delta \Omega_d + \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta \Omega_d \right), \quad (2)$$

\* [dankivolesya@ukr.net](mailto:dankivolesya@ukr.net)

де  $D$  – коефіцієнт дифузії;  $T$  – температура;  $k_B$  – стала Больцмана. Тут для визначення рухливості дефектів  $\mu$  використано співвідношення Ейнштейна.

Як бачимо з формули (2), швидкість дефектів у пружному полі визначається градієнтами деформації і концентрації дефектів та зміною об'єму кристалу цими дефектами. Аналіз цієї формули показує, що градієнт концентрації створює деформаційний потік, який напрямлений, на відміну від звичайного дифу-

зійного потоку, в сторону збільшення концентрації дефектів (перший доданок). Окрім цього, дефекти, які є центрами розтягу ( $\Delta\Omega_d > 0$ ) будуть рухатися в область, що зазнає відносного розтягу, а дефекти, які є центрами стиску ( $\Delta\Omega_d < 0$ ) будуть рухатися в область, що зазнає відносного стиску (другий доданок).

З урахуванням (2) потік дефектів можна записати у вигляді:

$$j = -D \frac{\partial N}{\partial r} + N \frac{DK\Delta\Omega_d}{k_B T} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\partial N}{\partial r} \Delta\Omega_d + \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^3 \varepsilon}{\partial r^3} r_{da}^2 \right). \quad (3)$$

Густина потенціальної енергії пружного континууму без дефектів з врахуванням ангармонічних доданків може бути представлена у вигляді:

$$U_a = K \left( \varepsilon^2/2 + \alpha \varepsilon^3/3 + \beta \varepsilon^4/4 + \alpha_0^2 \varepsilon \partial^2 \varepsilon / \partial r^2 \right), \quad (4)$$

де  $\alpha, \beta$  – константи пружного ангармонізму;  $\alpha_0$  – ха-

рактеристична відстань взаємодії атомів кристалічної матриці між собою, яка приблизно дорівнює параметру кристалічної ґратки матриці.

Тоді з урахуванням (1) та (4) вираз для густини вільної енергії кристалу з точковими дефектами матиме вигляд:

$$\Phi = U_a + N U_i - TS = K \left( \varepsilon^2/2 + \alpha \varepsilon^3/3 + \beta \varepsilon^4/4 + \alpha_0^2 \varepsilon \partial^2 \varepsilon / \partial r^2 - \frac{1}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N^2(r) \Delta\Omega_d^2 - N(r) \varepsilon(r) \Delta\Omega_d - N(r) \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right) - TS \quad (5)$$

де  $S$  – густина ентропії.

Використавши співвідношення  $\sigma_{rr} \equiv \sigma = \partial\Phi/\partial\varepsilon$ , отримаємо вираз для механічної напруги в дефект-

ному напівпровіднику без впливу ультразвуку:

$$\sigma = K \left( \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3 + \alpha_0^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial r^2} - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \Delta\Omega_d^2 - N \Delta\Omega_d - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \varepsilon(r) \Delta\Omega_d - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right) \quad (6)$$

Механічна напруга у твердому тілі, яке зазнає впливу ультразвуку, з урахуванням ангармонічних доданків:

де  $\varepsilon_0$  – амплітуда деформації, створеної ультразвуком. Тут враховано, що довжина хвилі  $\lambda \gg R_0$ . Усереднивши за часом, отримаємо:

$$\bar{\sigma} = \sigma + K \varepsilon_0 \cos \omega t + K \alpha (\varepsilon_0 \cos \omega t)^2 + K \beta (\varepsilon_0 \cos \omega t)^3, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= K \left( \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 \left(1 + \frac{\varepsilon_0^2}{2\varepsilon^2}\right) + \beta \varepsilon^3 + \alpha_0^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial r^2} - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \Delta\Omega_d^2 - N \Delta\Omega_d - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \varepsilon(r) \Delta\Omega_d - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right) = \\ &= K \left( \varepsilon + \tilde{\alpha} \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3 + \alpha_0^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial r^2} - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \Delta\Omega_d^2 - N \Delta\Omega_d - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \varepsilon(r) \Delta\Omega_d - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right) \end{aligned} \quad (8)$$

де  $\tilde{\alpha} = \alpha \left(1 + \frac{\varepsilon_0^2}{2\varepsilon^2}\right)$ .

З умови рівноваги деформованого тіла

та з врахуванням формули (8), отримаємо наступне нелінійне диференціальне рівняння для деформації  $\varepsilon(r)$ :

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial r} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \left(1 - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \Delta\Omega_d\right) + \tilde{\alpha} \frac{\partial(\varepsilon^2)}{\partial r} + \beta \frac{\partial(\varepsilon^3)}{\partial r} + \frac{\partial^3 \varepsilon}{\partial r^3} \left(\alpha_0^2 - \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} r_{da}^2 \Delta\Omega_d\right) - \frac{\partial N}{\partial r} \left(\frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} \Delta\Omega_d^2 + \Delta\Omega_d\right) = 0. \quad (10)$$

З врахуванням (3) стаціонарне рівняння дифузії можна записати у вигляді:

$$\operatorname{div} \left[ D \frac{\partial N}{\partial r} + N \frac{DK\Delta\Omega_d}{k_B T} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\partial N}{\partial r} \Delta\Omega_d + \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^3 \varepsilon}{\partial r^3} r_{da}^2 \right) \right] + G_d - \frac{N_d}{\tau_d} = 0, \quad (11)$$

де  $G_d$ ,  $\tau_d$  – швидкість генерації та час життя дефектів, відповідно.

Представимо концентрацію точкових дефектів та деформацію матриці у вигляді:

$$N(r) = N_1(r) + N_0, \quad (12)$$

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_1(r) + N_0 \Delta\Omega_d, \quad (13)$$

де  $N_0$  – середня концентрація дефектів;  $N_1(r)$ ,  $\varepsilon_1(r)$  – просторово-неоднорідні складові концентрації та деформації, відповідно;  $N_1(r) \ll N_0$ ;  $\varepsilon_1(r) \ll N_0 \Delta\Omega_d$ . Тоді

$$\frac{\partial N_1}{\partial r} - \frac{N_0 K \Delta\Omega_d}{k_B T} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\partial N_1}{\partial r} \Delta\Omega_d^2 + \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial r} + \frac{\partial^3 \varepsilon_1}{\partial r^3} r_{da}^2 \right) = 0, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial r} \left( 1 - \frac{\partial N_1}{\partial \varepsilon_1} \Delta\Omega_d \right) + \tilde{\alpha} \left( 2N_0 \Delta\Omega_d \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial r} + \frac{\partial(\varepsilon_1^2)}{\partial r} \right) + \beta \left( 3(N_0 \Delta\Omega_d)^2 \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial r} + 3N_0 \Delta\Omega_d \frac{\partial(\varepsilon_1^2)}{\partial r} + \frac{\partial(\varepsilon_1^3)}{\partial r} \right) + \\ + \frac{\partial^3 \varepsilon_1}{\partial r^3} \left( \alpha_0^2 - \frac{\partial N_1}{\partial \varepsilon_1} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right) - \frac{\partial N_1}{\partial r} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\partial N_1}{\partial \varepsilon_1} \Delta\Omega_d^2 + \Delta\Omega_d \right) = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Проінтегрувавши рівняння (15), отримаємо:

$$N_1 = \frac{1}{\Delta\Omega_d} \frac{N_0/N_c}{1 - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N_0/N_c} \left( \varepsilon_1 + \frac{\partial^2 \varepsilon_1}{\partial r^2} r_{da}^2 \right), \quad (17)$$

$$\text{де } N_c = \frac{k_B T}{K \Delta\Omega_d^2}.$$

Підставивши (17) у (16) та врахувавши, що  $\frac{\partial N_1}{\partial \varepsilon_1} = \frac{1}{\Delta\Omega_d} \frac{N_0/N_c}{1 - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N_0/N_c}$ , отримаємо рівняння

для деформації, яке після інтегрування можна записати у вигляді:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_1}{\partial r^2} - \alpha \varepsilon_1 + f \varepsilon_1^2 - c \varepsilon_1^3 = 0, \quad (18)$$

$$\text{де } \alpha(\varepsilon_0) = \frac{1-2\gamma-2\delta\gamma^2-2|\tilde{\alpha}|\eta+3\beta\eta^2}{2r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{\alpha_0^2}{2r_{da}^2} \right)};$$

$$f(\varepsilon_0) = \left( |\tilde{\alpha}| - 3\beta\eta \right) / \left( 2r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{\alpha_0^2}{2r_{da}^2} \right) \right);$$

$$c = \beta / 2 \left( r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{\alpha_0^2}{2r_{da}^2} \right) \right); \quad \delta = \frac{1}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu};$$

$$\gamma = \frac{N_0/N_c}{1-2\delta N_0/N_c}; \quad \eta = \frac{k_B T \gamma}{K \Delta\Omega_d (1+\delta\gamma)}.$$

Тут враховано, що  $\alpha < 0$ ,  $\beta > 0$  [12].

модифіковану під дією ультразвуку константу пружного ангармонізму можна представити у вигляді:

$$\tilde{\alpha} = \alpha \left( 1 + \frac{\varepsilon_0^2}{2(N_0 \Delta\Omega_d)^2 + \varepsilon_0^2} \right). \quad (14)$$

Підставивши (12) і (13) у (10) та (11) з врахуванням того, що  $N_1(r) \ll N_0$  та при  $r \rightarrow R_0$  повинні виконуватись умови  $\partial N_1/\partial r = 0$  та  $\partial \varepsilon_1/\partial r = 0$ , отримуємо, що  $N_0 = G_d \tau_d$  та рівняння для  $N_1(r)$  та  $\varepsilon_1(r)$ :

## 2.2 Формування нанокластерів точкових дефектів у напівпровіднику, що зазнає впливу ультразвуку

Розв'язок рівняння (18) має вигляд:

$$r = \int \frac{d\varepsilon_1}{\sqrt{a\varepsilon_1^2 - 2f\varepsilon_1^3/3 + 2c\varepsilon_1^4/4}}. \quad (19)$$

Ввівши змінну  $\varepsilon_1 = 1/z$ , цей інтеграл можна записати наступним чином:

$$r = -\int dz / \sqrt{a \left( z - \frac{f}{3a} \right)^2 + \Delta}, \quad (20)$$

де  $\Delta = -f^2/9a + c/2$ .

Інтеграл (20) виражається через аналітичні функції, тип яких визначається знаками коефіцієнтів  $a$  і  $\Delta$ .

Якщо  $a < 0$  і  $\Delta < 0$ , тобто параметр  $\gamma$  приймає значення з діапазону  $0 < \gamma < \gamma_c$

$\left( \gamma_c = -\frac{1}{2\delta} + \sqrt{\frac{1}{4\delta^2} + \frac{\alpha_0^2}{2\delta r_{da}^2}} \right)$ , то інтеграл (20) не виражається в дійсних функціях, а отже,  $\varepsilon_1 = 0$ , а  $N(r) = N_0$ , тобто процеси самоорганізації не відбуваються.

При перевищенні параметром  $\gamma$  критичного значення  $\gamma > \gamma_c$  просторово однорідний розв'язок стає нестійким і виникає новий просторово неоднорідний стаціонарний стан. Залежно від величини параметра  $\gamma$  (знаків коефіцієнтів  $a$  і  $\Delta$ ) розв'язок рівняння (20) матиме вигляд:

При перевищенні параметром  $\gamma$  критичного значення  $\gamma > \gamma_c$  просторово однорідний розв'язок стає нестійким і виникає новий просторово неоднорідний стаціонарний стан. Залежно від величини параметра  $\gamma$  (знаків коефіцієнтів  $a$  і  $\Delta$ ) розв'язок рівняння (20) матиме вигляд:

$$\varepsilon_1(r) = \text{sign}\Delta\Omega_d \frac{A}{B + \text{sh}(\sqrt{a}r)}, \quad \gamma_c < \gamma < \gamma_{c_1}, \quad (21)$$

$$\varepsilon_1(r) = \text{sign}\Delta\Omega_d \frac{A}{B + \text{ch}(\sqrt{a}r)}, \quad \gamma_{c_1} < \gamma < \gamma_{c_2}, \quad (22)$$

$$\varepsilon_1(r) = \text{sign}\Delta\Omega_d \frac{A}{B + \sin(\sqrt{a}r)}, \quad \gamma > \gamma_{c_2}, \quad (23)$$

де  $\gamma_{c_1}(\varepsilon_0) \approx 1/2 - \tilde{\alpha}^2(\varepsilon_0)/9\beta$ ;  $\gamma_{c_2} \approx 1/2$ ;  
 $A = 3\sqrt{2}|a|(|9ca - 2f^2|)^{-1/2}$ ;  $B = fA/3|a|$ .

Таким чином, при  $\gamma_c < \gamma < \gamma_{c_2}$  формуються кластери точкових дефектів, радіус яких може бути визначений наступним чином:

$$d(\varepsilon_0) = \frac{1}{\sqrt{a}} = \sqrt{\frac{2r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{\alpha_0^2}{2r_{da}^2} \right)}{1 - 2\gamma - 2\delta\gamma^2 - 2|\tilde{\alpha}|\eta + 3\beta\eta^2}}. \quad (24)$$

Як бачимо з формул (21)-(23), формування самоорганізованих нанокластерів можливе тільки при перевищенні параметром  $\gamma$  критичного значення  $\gamma > \gamma_c$ . А це спостерігається лише при перевищенні певного критичного значення концентрації дефектів (при заданій температурі), або при температурі, меншій за певне значення (при заданій концентрації дефектів), які залежать від амплітуди ультразвукової хвилі. Ультразвук впливає як на умови формування самоорганізованих кластерів, так і на їх розміри. Розмір кластера в основному визначається характеристичною відстанню взаємодії точкових дефектів з атомами матриці  $r_{da}$ , а також параметром  $\gamma$  (середньою концентрацією дефектів, пружними сталими матеріалу напівпровідникової структури, температурою та зміною об'єму кристалу одним дефектом  $\Delta\Omega_d$ ). Характеристична відстань взаємодії точкових дефектів з атомами матриці  $r_{da}$  залежить від концентрації дефектів, тобто від параметра  $\gamma$ , і може бути оцінена з графіка залежності вільної енергії пружно-деформованого кристалу  $\tilde{\Phi}(r_{da}) = \int \Phi(r, r_{da}) dV$  від величини  $r_{da}$ .

Оскільки всі необоротні процеси, які відбуваються при постійній температурі, супроводжуються зменшенням вільної енергії, то розміщення домішок у досліджуваній системі відповідатиме такому значенню  $r_{da}$ , при якому вільна енергія є мінімальною.

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЕЛЬНИХ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 1 приведено залежність розміру кластера точкових дефектів від величини їх відносної середньої концентрації без впливу ультразвуку (крива 1) та при різних значеннях амплітуди ультразвукової хвилі (криві 2-4). Розрахунки проводились за формулою (24), де параметр  $r_{da}$  визначався з умови мінімуму функції  $\tilde{\Phi}(r_{da})$ .

Розрахунки проводились для напівпровідника GaAs при наступних значеннях параметрів:  $T = 300 \text{ }^\circ\text{C}$ ;  $\Delta\Omega_d = 125 \text{ \AA}^3$ ;  $a_0 = 5 \text{ \AA}$ ;  $K = 0.45 \text{ eV/\AA}^3$ ;  $\nu = 0.35$ ;  $R_0 = 0.5 \text{ мкм}$ ;  $\frac{\alpha^2}{\beta} = 2$  [14].

Як бачимо з рис. 1, без дії ультразвуку розмір нанокластера суттєво залежить від концентрації дефектів і при зміні відносної концентрації у діапазоні  $0.05 \leq N_0/N_c \leq 0.2$  розмір нанокластера змінюється від 2 нм до 6 нм.

За наявності ультразвуку зміна концентрації дефектів призводить до незначної зміни розміру нанокластера. Так, при дії ультразвуку з амплітудою  $a_0 = 5 \cdot 10^{-5}$  (рис. 1, крива 4) при зміні концентрації в інтервалі  $0.05 \leq N_0/N_c \leq 0.2$  радіус нанокластера змінюється від 3,4 нм до 3,6 нм. Тому можна стверджувати, що за наявності дефектів з концентрацією з діапазону  $0.05 \leq N_0/N_c \leq 0.2$  під дією ультразвуку будуть формуватися однорідні за розмірами нанокластери.

За межами цього діапазону незначна зміна концентрації домішок призводить до суттєвої зміни розміру нанокластера (рис. 1). Тому при концентрації дефектів з середньою концентрацією  $N_0 < 0.05N_c$  та  $N_0 > 0.25N_c$  очікуваною є велика дисперсія розміру нанокластера. Наявність ультразвуку призводить до зменшення дисперсії радіуса сферичного нанокластера. Причому збільшення амплітуди ультразвукової хвилі призводить до зменшення дисперсії розміру нанокластера.

Окрім цього, ультразвукова обробка розширює інтервали концентрації дефектів та температурні інтервали, в межах яких можливе формування самоорганізованих нанокластерів.

Таким чином, обробка ультразвуком напівпровідникових матеріалів у процесі формування самоорганізованих нанокластерів (наприклад, під дією лазерного опромінення, у процесі молекулярно-променевої епітаксії та ін.) сприятиме створенню однорідних за розмірами нанокластерів. Це можна пояснити виникненням додаткових деформаційних потоків за рахунок неоднорідної деформації, створеної

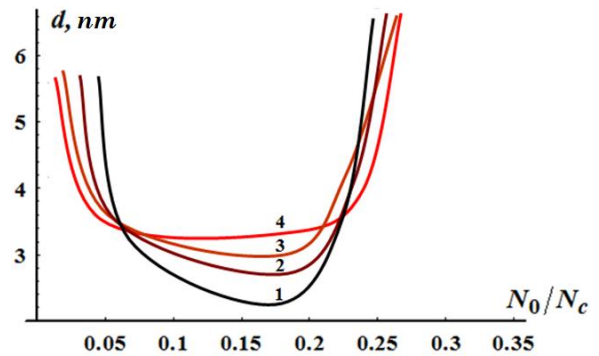


Рис. 1 – Залежність розміру кластера точкових дефектів від величини їх відносної концентрації: 1 –  $a_0 = 0$ ; 2 –  $a_0 = 10^{-6}$ ; 3 –  $a_0 = 10^{-5}$ ; 4 –  $a_0 = 5 \cdot 10^{-5}$

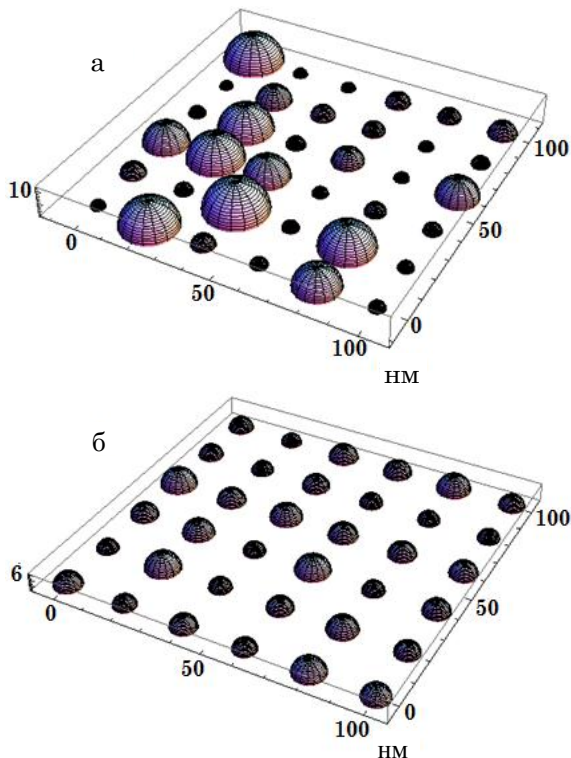
ультразвуковою хвилею, що призводить до обмежен-

ня рухливості атомів нанокластера [7, 15].

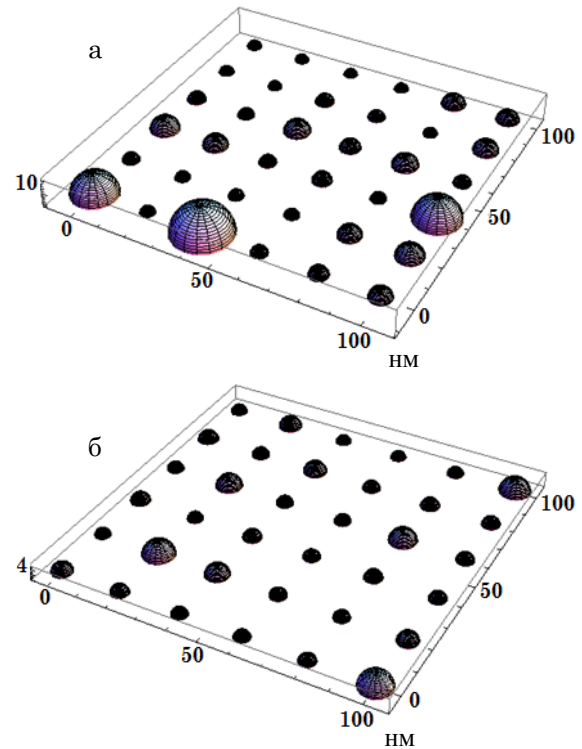
Окрім цього, наявність ультразвуку змінює середнє значення деформації  $i$ , відповідно, величину поверхневої енергії масиву тривимірних когерентно напружених острівців (КТ). У роботі [16] показано, що характер залежності поверхневої енергії від розміру острівців визначається параметром  $\alpha$ , який дорівнює відноській зміні поверхневої енергії при утворенні одного острівця. Зміна величини деформації за рахунок ультразвуку призводить до зменшення параметра  $\alpha$ , і, відповідно, система острівців стає більш стійкою відносно коалесценції [16].

У запропонованій моделі не враховано залежність пружної енергії  $i$ , відповідно, розміру нанокластера від частоти ультразвуку. Правильний вибір частоти ультразвуку (довжини хвилі) повинен сприяти збільшенню амплітуди звукової хвилі  $i$ , відповідно, зменшенню дисперсії розмірів нанокластерів. Можна припустити, що максимальне збільшення амплітуди акустичної хвилі буде спостерігатись при певному співвідношенні між довжиною хвилі та відстанню між нанокластерами і їх розмірами [8, 17]. Також запропонована модель не враховує пружну взаємодію між окремими нанокластерами. Таке наближення справедливе у випадку, коли радіус нанокластерів набагато менший від відстані між ними ( $d \ll R_0$ ).

Як бачимо з рис. 1, дисперсія розмірів нанокластерів визначається розкидом середньої концентрації дефектів  $N_0$ . Цей параметр є технологічно контрольований при будь-якому методі отримання нанокластерів (метод молекулярно-променевої епітаксії, іонної імплантації, лазерного опромінення), але одночасно з



**Рис. 2** – Геометрична модель масиву квантових точок, отриманого без обробки ультразвуком (а) та з дією ультразвуку (б), у випадку рівномірного розподілу концентрації дефектів



**Рис. 3** – Геометрична модель масиву квантових точок, отриманого без обробки ультразвуком (а) та з дією ультразвуку (б), у випадку нормального розподілу концентрації дефектів

цим є випадковою величиною (наприклад, за рахунок флуктуацій інтенсивності джерела опромінення чи флуктуацій концентрації власних дефектів).

На рис. 2, 3 представлено геометричну модель масиву сферичних квантових точок, отриманих без обробки ультразвуком (рис. 2 а, рис. 3 а) та при ультразвуковій обробці з амплітудою ультразвукової хвилі  $\omega_0 = 5 \cdot 10^{-5}$  (рис. 2 б, рис. 3 б), у випадку рівномірного розподілу концентрації дефектів з діапазону  $0.02 \leq N_0 \leq 0.27N_c$  (рис. 2) і нормального розподілу концентрації дефектів із середнім значенням  $N_0 = 0.145N_c$  та середнім квадратичним відхиленням  $\sigma_0 = 0.05N_c$  (рис. 3). Радіус сферичного нанокластера визначався за формулою (24) (рис. 1) з врахуванням того, що середня концентрація дефектів задавалась генератором випадкових чисел з відповідним законом розподілу ( $f(N_0) = 1/0.25N_c$  або

$$f(N_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} e^{-\frac{(N_0 - 0.145N_c)^2}{2\sigma_0^2}})$$

за допомогою системи комп'ютерної математики Mathematica. За одиницю вимірювання, однакову для всіх трьох осей на рис. 2, 3, вибрано нанометр (нм). Відстань між нанокластерами 20 нм.

Комп'ютерна візуалізація масиву квантових точок дозволяє оцінити вплив ультразвуку на формування однорідних за розмірами нанокластерів при різних параметрах кристалу та різних методах отримання. Як видно з рис. 2, 3, вплив ультразвуку є більш ефективним для формування масиву квантових точок з незначною дисперсією їх розмірів, якщо функція розподілу концентрації дефектів  $f(N_0)$  є ста-

лою величиною (рівномірний розподіл концентрації дефектів). Теоретичні розрахунки якісно співпадають з експериментальними результатами, отриманими в роботі [11].

#### 4. ВИСНОВКИ

Побудовано нелінійну модель формування самоорганізованих нанокластерів у напівпровіднику, що піддається впливу ультразвуку. В межах даної моделі встановлено критерії (температура, концентрація дефектів, амплітуда ультразвукової хвилі) формування однорідних за розмірами самоорганізованих

нанокластерів. Показано, що вплив ультразвуку призводить до розширення інтервалів концентрації дефектів та температури, в межах яких можливе утворення нанокластерів. Встановлено, що із збільшенням амплітуди ультразвукової хвилі зменшується дисперсія розміру нанокластера. Це можна пояснити виникненням додаткових деформаційних потоків за рахунок неоднорідної деформації, створеної ультразвуковою хвилею, що призводить до обмеження рухливості атомів нанокластера, та змінюю величини поверхневої енергії масиву тривимірних когерентно напружених острівців.

## The Influence of Ultrasound on Formation of Self-organized Uniform Nanoclusters

R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv

*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, 24, Ivan Franko St., 82100 Drohobych, Ukraine*

The non-linear diffusion-deformation theory of self-organization of nanoclusters of dot defects in semiconductor exposed to ultrasound treatment that considers the interaction of defects among themselves and with atoms of a matrix via the elastic field created by dot defects and an acoustic wave is developed. Within this theory the influence of ultrasound on the conditions of formation of spherical nanoclusters and their radius is investigated. The nanocluster size depending on average concentration of defects and amplitude of an acoustic wave is determined. It is established that ultrasonic treatment of the semiconductor in the process of formation of an ensemble of nanoclusters leads to reduction of dispersion of their sizes.

**Keywords:** Self-organized nanocluster, Ultrasound, Deformation, Dot defects.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. V.A. Zinovyev, A.V. Dvurechenskii, P.A. Kuchinskaya, V.A. Armbrister, S.A. Teys, A.A. Shklyayev, A.V. Mudryi, *Semiconductors* **49**, 149 (2015).
2. I. Yamada, J. Matsuo, N. Tojoda, *Phys. Research B* **206**, 820 (2003).
3. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *J. Phys. Stud.* **17**, 2601 (2013) [in Ukrainian].
4. A.I. Vlasenko, A. Baidullaeva, V.P. Veleschuk, P.E. Mozol, N.I. Boiko, O.S. Litvin, *Semiconductors* **49**, 229 (2015).
5. E. Sadeghi, *Phys. E* **73**, 1 (2015).
6. B.V. Novikov, G.G. Zegrya, R.M. Peleshchak, O.O. Dan'kiv, V.A. Gaisin, V.G. Talalaev, I.V. Shtorm, G.E. Cirlin, *Semiconductors* **42**, 1076 (2008).
7. R.M. Peleshchak, S.K. Guba, O.V. Kuzyk, I.V. Kurilo, O.O. Dan'kiv, *Semiconductors* **47**, 349 (2013).
8. J.R. Gell, M.B. Ward, R.J. Young, R.M. Stevenson, P. Atkinson, D. Anderson, G.A.C. Jones, D.A. Ritchie, A.J. Shields, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 081115 (2008).
9. R.M. Peleshchak, I.I. Lazurchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, G.G. Zegrya, *Semiconductors* **50**, 314 (2016).
10. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *Cond. Mat. Phys.* **18**, 43801 (2015).
11. W. Yang, B. Zhang, N. Ding, W. Ding, L. Wang, M. Yu, Q. Zhang, *Ultrasonics Sonochemistry* **30**, 103 (2016).
12. V.I. Emel'yanov, *Laser Phys.* **18**, 1435 (2008).
13. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *Cond. Mat. Phys.* **17**, 23601 (2014).
14. V.I. Emel'yanov, I.M. Panin, *Laser Phys.* **6**, 971 (1996).
15. B.N. Zvonkov, I.A. Karpovich, N.V. Baidus, D.O. Filatov, S.V. Morozov, *Semiconductors* **35**, 93 (2001).
16. N.N. Ledentsov, V.M. Ustinov, V.A. Shchukin, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov, D. Bimberg, *Semiconductors* **32**, 343 (1998).
17. P.M. Tomchuk, N.I. Grigorchuk, D.V. Butenko, *Ukr. J. Phys.* **55**, 440 (2010).