

Деформаційний потенціал акустичної квазірелеєвської хвилі, взаємодіючої з адсорбованими атомами

М.Я. Сенета*, Р.М. Пелещак

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

(Одержано 14.03.2017, у відредагованій формі – 21.04.2017, опубліковано online 30.06.2017)

У межах моделі взаємодії адатомів з самоузгодженою акустичною квазірелеєвською хвилею в довгохвильовому наближенні з врахуванням нелокальної пружної взаємодії адсорбованого атома з атомами матриці та сил дзеркального зображення побудовано деформаційний потенціал акустичної квазірелеєвської хвилі, взаємодіючої з адсорбованими атомами. Розраховано залежність амплітуди деформаційного потенціалу і висоти нерівності поверхні від концентрації адсорбованих атомів.

Ключові слова: Деформаційний потенціал, Адатиomi, Висота нерівності поверхні, Сили дзеркального зображення, Нелокальна пружна взаємодія.

DOI: 10.21272/jnep.9(3).03032

PACS numbers: 81.07.Bc, 68.60.Bs

1. ВСТУП

Розвиток сучасної мікро- і наноелектроніки потребує дослідження механізмів збудження електронних станів на поверхні напівпровідників. Одним із механізмів є неоднорідна деформація приповерхневого шару напівпровідника, зумовлена як поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею (ПАХ), так і адсорбованими атомами [1-3]. Крім цього, взаємодія адатомів з поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею, зумовлена деформаційним потенціалом, перенормує спектр поверхневих електронних станів. Зокрема, існування поверхневих електронних станів може привести до зміни коефіцієнтів відбивання електромагнітних хвиль від межі розділу середовищ та до зміни закону дисперсії плазмових коливань [4].

У наш час добре відомо, що на межі напівпровідників можуть виникати різного роду поверхневі електронні стани. Зокрема, у роботі [5] автори дослідили електронні властивості напівпровідника, обмеженого нерівною поверхнею з нескінченно високим потенціальним бар'єром, яка зумовлена квазірелеєвською поверхневою акустичною хвилею.

У цій роботі в межах моделі нелокальної пружної взаємодії через поле деформації адатомів із самоузгодженою акустичною квазірелеєвською хвилею отримано вирази для висоти нерівностей $\zeta(N_{od})$ поверхні напівпровідника та деформаційного потенціалу, створених адсорбованими атомами і поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею (ПАХ).

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. ВИХІДНІ РІВНЯННЯ ТА КРАЙОВІ УМОВИ

Нехай в приповерхневому шарі кубічного кристалу (GaAs, CdTe (100)) при дії на нього потоку атомів у процесі молекулярно-променевої епітаксії або імплантації, адсорбуються атоми з середньою концентрацією N_{od} . Завдяки потенціалу деформації та за рахунок локального перенормування поверхневої енергії адатоми і деформаційне поле поверхневої

акустичної квазірелеєвської хвилі неоднорідно деформують приповерхневий шар. У свою чергу, ця неоднорідна самоузгоджена деформація через потенціал деформації перерозподіляє адатоми уздовж поверхні (рис. 1а, 1б). Вплив адсорбованих атомів зводиться до зміни межових умов для тензора напруг σ_{ij} на поверхні $z = 0$. Дефектно-збагачений адатомами шар буде розглядати як "плівку" товщиною a з густиною ρ і модулем Юнга E , жорстко зв'язану з субстратом – решітка частини монокристалу. Площина з'єднання "плівки" з субстратом $z = a$ паралельна поверхні (100).

Поверхнева акустична квазірелеєвська хвиля, яка розповсюджується в напрямку осі x з частотою $\omega'(q, N_{od})$, створює динамічну деформацію та взаємодіє з адатомами. Форма деформованої поверхні вздовж координати x в залежності від часу може бути описана наступною функцією:

$$z_0(x, t) = \zeta(N_{od}) \cos(qx - \omega'(q, N_{od}) \cdot t)$$

де $q = 2\pi/L_x$, L_x – період нерівностей (довжина акустичної хвилі) уздовж осі x ; $\omega'(q, N_{od}) = \text{Re}(\omega)$; $\omega = \omega' + i\omega''$ – закон дисперсії квазірелеєвської хвилі, перенормований адатомами [6]; $\zeta(N_{od})$ – висота нерівностей, її величина дорівнює сумі нормальних складових вектора зміщення поздовжньої і поперечної хвиль відповідно на площині $z = 0$:

$$\zeta(N_{od}) = |u'_z(0)| + |u''_z(0)|. \quad (1)$$

Компоненти $u'_z(0)$, $u''_z(0)$ вектора зміщення точок середовища знаходяться з розв'язку рівняння [7]:

$$\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = c_i^2 \Delta_i \vec{u} + (c_i^2 - c_s^2) \overline{\text{grad}(\text{div} \vec{u})}. \quad (2)$$

Розв'язком рівняння (2) для поверхневої хвилі Релея, яка розповсюджується у напрямку осі x (рис. 1), представляємо у вигляді:

* marsen18@i.ua

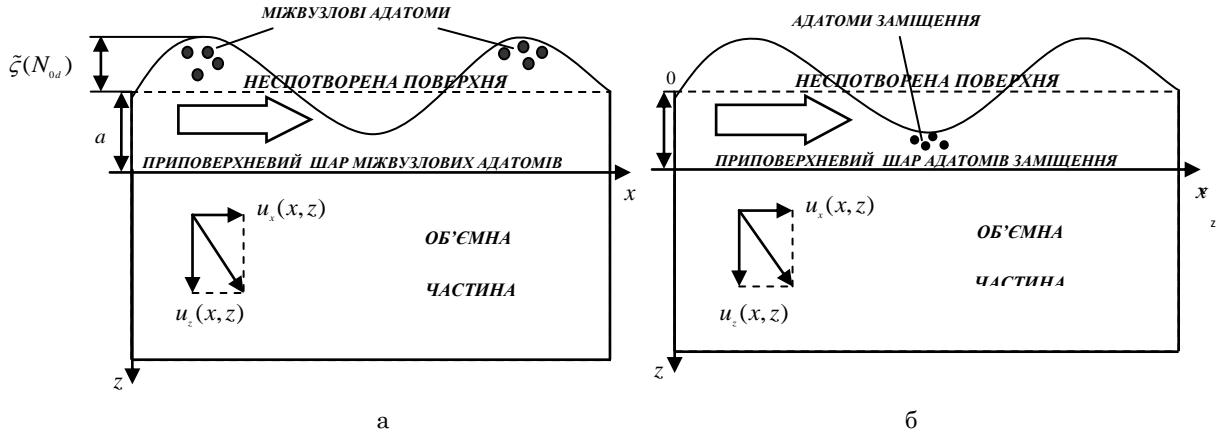


Рис. 1 – Модель нерівної поверхні, деформованої поверхневою акустичною хвилею та адсорбованими атомами; 1а – положення адатомів, які знаходяться у міжвузлях, тобто адатоми збираються в областях максимальної деформації розтягу; 1б – положення адатомів, які знаходяться у вузлах поверхневої кристалічної ґратки, ковалентно-іонний радіус яких є менший за ковалентно-іонний радіус атома поверхневої кристалічної ґратки. У цьому випадку адатоми збираються в областях максимальної деформації стиску

$$u_x(x, z) = -iqAe^{iqx-i\omega t-k_iz} - ik_l B e^{iqx-i\omega t-k_iz} \quad (3)$$

$$u_z(x, z) = k_l A e^{iqx-i\omega t-k_iz} + q B e^{iqx-i\omega t-k_iz}, \quad (4)$$

де $k_{lz}^2 = q^2 - \omega^2/c_l^2$; A, B – амплітуди ПАХ.

Напрямок x на поверхні кристала визначається пружною анізотропією, а на ізотропній поверхні визначається зовнішньою дією, яка індукє пружну анізотропію або завдяки спонтанному порушенню симетрії дефектно-деформаційної системи. Просторово-неоднорідна поверхнева деформація $\varepsilon(x, t)$ приводить до неоднорідного перерозподілу адатомів:

$$N_d(x, t) = N_{0d} + N_{1d}(x, t) = N_{0d} + N_{1d}(q)e^{iqx-i\omega t},$$

де N_{0d} – просторово-однорідна складова; $N_{1d}(q)$ – амплітуда періодичного збурення ($N_{1d} \ll N_{0d}$) [8].

Енергія взаємодії адатома з атомами матриці в наближенні нелокального закону Гука дорівнює

$$W_{da}^{int}(x) = -K_d \varepsilon(x) \Delta \Omega_d - K_d \frac{\partial^2 \varepsilon(x)}{\partial x^2} l_d^2 \Delta \Omega_d, \quad (5)$$

де K – модуль пружності; l_d^2 – середнє значення квадрата характеристичної відстані взаємодії адатома з атомами матриці, $\Delta \Omega_d$ – зміна об'єму кристала, зумовлена одним адсорбованим атомом [6].

Поряд із пружною взаємодією адсорбованих атомів існує взаємодія, пов'язана з силами дзеркального зображення, прикладеними до поверхні кристала.

$$W_{da}^{int}(x) = -\frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \theta_d^2 N_d(x), \quad (6)$$

де ν – коефіцієнт Пуассона; $\theta_d = K \Delta \Omega_d$ – поверхневий деформаційний потенціал [9].

З урахуванням взаємодій (5), (6) рівняння для концентрації адатомів запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} & (-i\omega + D_d(1 - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \frac{\theta_d^2}{k_B T} N_{0d}) q^2) N_{1d}(q) = \\ & = D_d \theta_d / k_B T N_{0d} \varepsilon(q) q^2 (1 - l_d^2 q^2), \end{aligned}$$

де D_d – коефіцієнт дифузії адатома; T – температура; k_B – стала Больцмана.

Просторово-неоднорідний розподіл адатомів модує поверхневу енергію, що приводить до виникнення латеральної механічної напруги, яка компенсується напругою зсуву в середовищі [9]. Межова умова виражає баланс латеральних напруг:

$$\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \Big|_{z=0} = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right) \frac{\partial N_{1d}(x)}{\partial x}, \quad (7)$$

де μ – модуль зсуву середовища; $\partial F / \partial N$ розглядаємо як заданий феноменологічний параметр.

Крім цього, в результаті взаємодії адатомів з атомами напівпровідника на поверхні виникає нормальна механічна напруга, де межовою умовою є:

$$\left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + (1-2\beta) \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) \Big|_{z=0} = \frac{\theta_d N_{1d}(x)}{\rho c_l^2 a}, \quad (8)$$

де a – параметр кристалічної ґратки на поверхні напівпровідника; $\beta = c_l^2/c_t^2$; ρ – густина кристалу.

З межових умов (7) і (8) з урахуванням (3) і (4) та умови ортогональності векторів зміщення \vec{u}_n, \vec{u}_m ($n, m = x, y, z$)

$$\frac{1}{a^3} \int_0^{1/k_l} u_z^*(x, z) u_z(x, z) dz = 1$$

отримуємо співвідношення для амплітуд $|A|$ і $|B|$, які входять у вираз для висоти нерівності (1):

$$\tilde{\zeta} = k_l |A| + q |B|,$$

де $1/k_l$ глибина проникнення акустичної хвилі в напівпровідник;

$$\begin{aligned}
 |A| &= \sqrt{a^3 \left/ \left(\frac{k_l}{2} \left(1 - \frac{1}{e^2}\right) + \frac{k_l}{k_l + k_t} \frac{-k_l^2 + (1-2\beta)q^2 + M}{\beta k_t} \left(1 - \frac{1}{e^{1+k_t/k_l}}\right) + \frac{q^2}{2k_t} \frac{(-k_l^2 + (1-2\beta)q^2 + M)^2 + Z^2}{(2\beta k_t q)^2} \left(1 - \frac{1}{e^{2k_t/k_l}}\right) \right)} \right. \\
 |B| &= 2 \sqrt{\frac{(-k_l^2 + (1-2\beta)q^2 + M)^2 + Z^2}{(2\beta k_t q)^2}} \\
 &\times \sqrt{a^3 \left/ \left(\frac{k_l}{2} \left(1 - \frac{1}{e^2}\right) + \frac{k_l}{k_l + k_t} \frac{-k_l^2 + (1-2\beta)q^2 + M}{\beta k_t} \left(1 - \frac{1}{e^{1+k_t/k_l}}\right) + \frac{q^2}{2k_t} \frac{(-k_l^2 + (1-2\beta)q^2 + M)^2 + Z^2}{(2\beta k_t q)^2} \left(1 - \frac{1}{e^{2k_t/k_l}}\right) \right)} \right. \\
 M &= -\frac{\omega^2}{c_l^2} \frac{\theta_d^2}{\rho c_l^2 a} \frac{D_d^2 N_{0d}}{D_d^2 q^4 + \omega^2} \frac{q^2}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2); \quad Z = -\frac{\omega^3}{c_l^2} \frac{\theta_d^2}{\rho c_l^2 a} \frac{D_d N_{0d}}{D_d^2 q^4 + \omega^2} \frac{q^2}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2); \\
 \omega' &= c_t q \xi_0 \left(1 - \frac{1}{f'(\xi_0)} \frac{2\xi_0 \theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_l^2} \cdot \frac{D_d^2 q^2 \left(1 - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \frac{\theta_d^2}{k_B T} N_{0d}\right)}{\left(D_d \left(1 - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \frac{\theta_d^2}{k_B T} N_{0d}\right) \right)^2 q^2 + c_t^2 \xi_0^2} \right) \\
 &\times \left(q \sqrt{1 - \xi_0^2} \frac{\partial F}{\partial N} + (2 - \xi_0^2) \frac{\theta_d}{2a} \right)
 \end{aligned} \tag{4}$$

Деформаційний потенціал, створений поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею та адатомами, визначається співвідношенням:

$$V(x, z, t) = \lambda_{ij} \partial u_i(x, y, z) / \partial x_{oj}, \tag{9}$$

де $u_i = u_i^l + u_i^t$; λ_{ij} – тензор деформаційного потенціалу візьмемо у вигляді $\lambda_{ij} = \lambda \delta_{ij}$. За подвійними індексами у формулі (9) ведеться сумування. Підставляючи у формулу (9) компоненти вектора зміщення $u_i(x, z, t)$ (3), (4), отримуємо

$$V(x, z, t) = V_0 e^{-kz} e^{ikx - i\omega t},$$

де $V_0 = -\frac{|k| \tilde{\zeta} q^2 (2 - \xi_0) c_l^2}{k_l c_t^2}$, ξ_0 – число, яке залежить від співвідношення між поздовжньою c_l і поперечною c_t швидкостями звуку [6].

3. ЧИСЛОВИЙ РОЗРАХУНОК АМПЛІТУДИ НЕРІВНОСТІ ПОВЕРХНІ ТА ДЕФОРМАЦІЙНОГО ПОТЕНЦІАЛУ АКУСТИЧНОЇ КВАЗИРЕЛЕЄВСЬКОЇ ХВИЛІ

Числовий розрахунок залежності амплітуди деформаційного потенціалу V_0 та нерівності поверхні, які зумовлені поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею та адсорбованими атомами, проводився для напівпровідника GaAs (100) при наступних значеннях параметрів:

$$\begin{aligned}
 l_d &= 2,9 \text{ нм}; \quad a = 0,565 \text{ нм}; \quad \lambda = 5 \text{ еВ}; \quad c_l = 4400 \text{ м/с}; \\
 c_t &= 2475 \text{ м/с}; \quad \rho = 5320 \text{ кг/м}^3; \\
 T &= 100 \text{ К}; \quad q = 0,025 \text{ \AA}^{-1};
 \end{aligned}$$

$$D_d = 5 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}; \quad \theta_d = 10 \text{ еВ}; \quad \partial F / \partial N = 0,1 \text{ еВ}.$$

Значення характеристичної довжини l_d взаємодії адатома з атомами ґратки знайдене з умови мінімуму вільної енергії кристала з адсорбованими атомами.

З рисунку 2 видно, що функціональна залежність висоти нерівності від концентрації адсорбованих атомів є немонотонною. Нелогальна взаємодія адсорбованих атомів через неоднорідне деформаційне поле із збільшенням концентрації адсорбованих атомів приводить до повільнішого зростання функціональної залежності $\tilde{\zeta} = \tilde{\zeta}(N_{0d})$ на інтервалі концентрації адатомів $0 < N_{0d} \leq 5,8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ та до зміщення максимуму висоти нерівності поверхні в сторону більших концентрацій, ніж у випадку її відсутності.

Таку немонотонну поведінку залежностей висоти нерівності від концентрації адсорбованих атомів $\tilde{\zeta} = \tilde{\zeta}(N_{0d})$ (рис. 2а) можна пояснити дією двох конкуруючих факторів: механічною деформацією поверхневої кристалічної ґратки, створеною механічною дією адатомів (геометричний масштабний фактор), та взаємодією адсорбованих атомів через деформаційне поле, створене як поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею, так і адсорбованими атомами. Зокрема, в інтервалі концентрацій адатомів $N_{0d} = 2,8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ($l_d = 0$), $0 < N_{0d} \leq 5,8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ($l_d = 2,9 \text{ нм}$) переважає геометричний масштабний фактор, тоді як за межами цих інтервалів концентрації адсорбованих атомів переважає взаємодія адсорбованих атомів через деформаційне поле.

Сили дзеркального зображення приводять до зменшення висоти нерівності поверхні, звуження інтервалу концентрації адсорбованих атомів, в якому

переважає геометричний масштабний фактор, та до зсуву максимуму функціональної залежності $\zeta = \zeta(N_{ad})$ в сторону менших концентрацій (рис. 2б). Зокрема, максимальне значення висоти нерівності зменшується на $\Delta\zeta = 0,221 \text{ \AA}$ та на $\Delta\zeta = 0,319 \text{ \AA}$ при $l_d = 0$ і $l_d = 2,9 \text{ нм}$, відповідно.

Як видно з рис. 3, функціональна залежність амплітуди деформаційного потенціалу V_0 від концентрації адсорбованих атомів є інверсією функціональ-

ної залежності $\zeta = \zeta(N_{ad})$ відносно осі концентрації N_{ad} з урахуванням масштабного фактору $|z|q^2(2-\xi_0)c_i^2/k_i c_i^2$, який входить у вираз для амплітуди деформаційного потенціалу V_0 .

У випадку неврахування сил дзеркального зображення нелокальна взаємодія адсорбованих атомів через неоднорідне деформаційне поле приводить

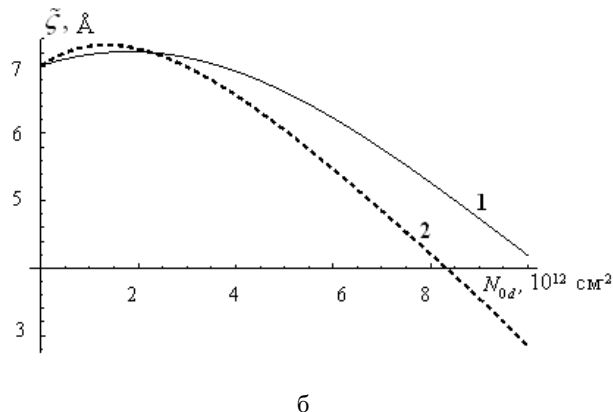
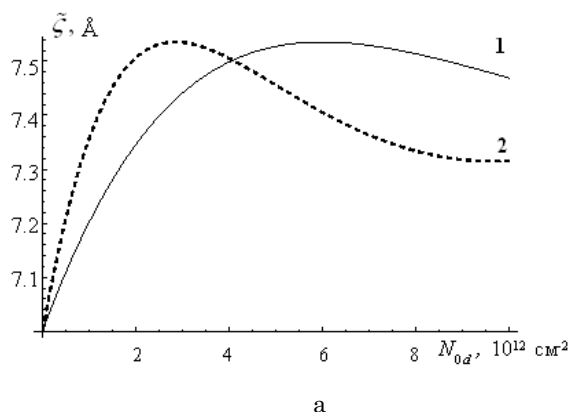


Рис. 2 – Залежність висоти нерівності поверхні від концентрації адсорбованих атомів без врахування (а) та з врахуванням (б) сил дзеркального зображення при $q = 0,25 \text{ нм}^{-1}$: 1 – з урахуванням нелокальної взаємодії ($l_d = 2,9 \text{ нм}$) адсорбованого атома з атомами матриці; 2 – без врахування нелокальної взаємодії ($l_d = 0$) адсорбованого атома з атомами матриці

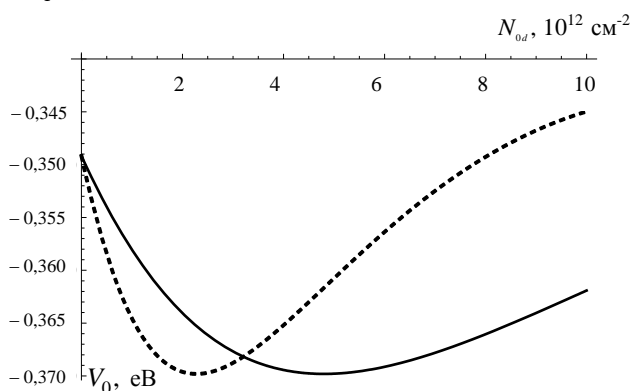


Рис. 3 – Залежність амплітуди деформаційного потенціалу від концентрації адсорбованих атомів без врахування сил дзеркального зображення при $q = 0,25 \text{ нм}^{-1}$: 1 – з урахуванням нелокальної взаємодії ($l_d = 2,9 \text{ нм}$) адсорбованого атома з атомами матриці; 2 – без врахування нелокальної взаємодії ($l_d = 0$) адсорбованого атома з атомами матриці

тільки до зміщення максимуму глибини потенціальної ями в сторону більших концентрацій адсорбованих атомів і практично не впливає на максимальне значення її глибини (рис. 4), тобто при $l_d = 0$ і $l_d = 2,9 \text{ нм}$, $V_{0max} = -0,370 \text{ еВ}$.

4. ВИСНОВКИ

1. Розвинуто теорію деформаційного потенціалу поверхневої акустичної квазірелеєвської хвилі, взаємодіючої з адсорбованими атомами, з врахуванням як нелокальної пружної взаємодії адатомів з атомами матриці, так і взаємодії адсорбованих атомів, зумовленої силами дзеркального зображення.

2. Показано, що функціональні залежності висоти нерівності поверхні та деформаційного потенціалу від концентрації адсорбованих атомів мають немонотонний характер, зумовлений двома конкуруючими факторами: механічною деформацією поверхневої кристалічної ґратки, створеною механічною дією адсорбованих атомів (геометричний масштабний фактор), та взаємодією адсорбованих атомів через деформаційне поле, створене як поверхневою акустичною квазірелеєвською хвилею, так і адсорбованими атомами.

3. Встановлено, що сили дзеркального зображення приводять до зменшення висоти нерівності поверхні (абсолютного значення деформаційного потенціалу), звуження інтервалу концентрації адсорбованих атомів, в якому переважає геометричний масштабний фактор, та до зсуву максимуму функціональної залежності висоти нерівності поверхні $\zeta = \zeta(N_{ad})$ (деформаційного потенціалу $V_0 = V_0(N_{ad})$) у сторону менших концентрацій.

**Деформационный потенциал акустической квазирелееевской волны,
взаимодействующей с адсорбированными атомами**

М.Я. Сенета, Р.М. Пелешчак

*Дрогобычский государственный педагогический университет имени И. Франко, ул. Ивана Франко, 24, 82100
Дрогобыч, Украина*

В рамках модели взаимодействия адатомов с самосогласованной акустической квазирелееевской волной в длинноволновом приближении с учетом нелокального упругого взаимодействия адсорбированного атома с атомами матрицы и сил зеркального изображения построено деформационный потенциал акустической квазирелееевской волны, взаимодействующей с адсорбированными атомами. Рассчитано зависимость амплитуды деформационного потенциала и высоты неровности поверхности от концентрации адсорбированных атомов.

Ключевые слова: Деформационный потенциал, Адаптомы, Высота неровности поверхности, Силы зеркального изображения, Нелокальное упругое взаимодействие.

Deformation Potential of Acoustic Quasi-Rayleigh Wave Interacting with Adsorbed Atoms

M.Ya. Seneta, R.M. Peleshchak

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, 24, Ivan Franko Str., 82100 Drohobych, Ukraine

Within the model of interaction between adatoms and self-consistent acoustic quasi-Rayleigh wave in the long-wavelength approximation, taking into account the nonlocal elastic interaction between adsorbed atoms and matrix atoms and the mirror image forces, the deformation potential of acoustic quasi-Rayleigh wave interacting with adsorbed atoms is found. The dependence of deformation potential amplitude and height of surface irregularity on the adsorbed atoms concentration is calculated.

Keywords: Deformation potential, Adatoms, Height of surface irregularity, Mirror image forces, Nonlocal elastic interaction.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. R.M. Peleshchak, I.Ya. Bachynsky, *Condens. Matter Phys.* **12**, 215 (2009).
2. V.I. Emel'yanov, A. Baidullaeva, A.I. Vlasenko, P.E. Mozol', *Quantum Electron.* **38**, 245 (2008).
3. S.V. Vintsents, A.V. Zaitseva, V.B. Zaitsev, G.S. Plotnikov, *Semiconductors* **38**, 245 (2004).
4. S.I. Khankina, V.M. Yakovenko, I.V. Yakovenko, *Radio-physics and Quantum Electronics* **45**, 813 (2002).
5. S.I. Khankina, V.M. Yakovenko, I.V. Yakovenko, *J. Exp. Theor. Phys.* **104**, 467 (2007).
6. R.M. Peleshchak, M.Ya. Seneta, *Condens. Matter Phys.* **19**, 43801 (2016).
7. V.M. Kovalev, A.V. Chaplik, *J. Exp. Theor. Phys.* **120**, 312 (2015).
8. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *J. Phys. Stud.* **17**, 2601 (2013).
9. V.I. Emel'yanov, K.I. Eremin, *JETP Lett.* **75**, 98 (2002).