

## ФОРМУВАННЯ ПЕРІОДИЧНИХ ДЕФЕКТНИХ СТРУКТУР У НАПІВПРОВІДНИКАХ ПІД ВПЛИВОМ АКУСТИЧНОЇ ХВИЛІ

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

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

(Отримано 9 березня 2011 р.)

Побудовано деформаційно-дифузійну модель просторово-часового перерозподілу точкових дефектів під впливом акустичної хвилі. Запропонована теорія враховує деформацію, створену акустичною хвилею та точковими дефектами. Показано, що під дією акустичної хвилі в напівпровіднику формуються періодичні дефектно-деформаційні структури з періодом, що дорівнює довжині хвилі.

**Ключові слова:** точкові дефекти, акустична хвиля, дифузія, деформація.

PACS number(s): 66.30.Lw, 43.35.Fj

### I. ВСТУП

Відомо, що оптичні та електричні властивості напівпровідників 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 з уведенням домішок у напівпровідникову структуру. Характер деформації кристалічної ґратки визначається як наявністю точкових дефектів, так і впливом зовнішніх факторів, наприклад, акустичної хвилі.

У працях [1–3] показано, що за допомогою ультразвукової хвилі можна керувати транспортними властивостями напівпровідників та змінювати їхню структуру, що пов'язано з процесами дифузії атомів домішки, розпаду і утворення комплексів, утворення кластерів атомів домішок та власних дефектів у періодичних деформаційних полях. Зокрема в статті [4] показано, що вплив ультразвуку приводить до зменшення швидкості поверхневої генерації і збільшення генераційної тривалості життя неосновних носіїв заряду на межі поділу кремній – діоксид кремнію. Це пояснюється перебудовою дефектної структури перехідного шару на межі поділу Si–SiO<sub>2</sub>. У роботі [5] експериментально встановлено, що ультразвукова обробка кремнію може стимулювати дифузійні процеси при кімнатних температурах.

В експериментальній роботі [6] досліджено вплив акустичної хвилі на фізико-хімічні й електричні властивості структури метал/*n*–*n*<sup>+</sup>/GaAs та показано, що акустична обробка приводить до просторової впорядкованості приконтатної ділянки, що зумовлює зменшення зворотного струму в діодах Шотткі. Наявність зовнішньої неоднорідної деформації є причиною зміни хімічного потенціалу точкових дефектів [7] і, відповідно, приводить до виникнення напрямлених дифузійних потоків.

Тому виникає необхідність побудови теоретичної

моделі, яка б описувала самоузгоджені дифузійно-деформаційні явища в напівпровідниках із власними точковими дефектами та домішками, що піддаються впливу акустичної хвилі.

У цій праці в межах механіко-деформаційного підходу розраховано концентраційний профіль розподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів і вакансій) та параметр деформації ґратки в напівпровідниковому бездислокаційному матеріалі GaAs, що піддається впливу акустичної хвилі.

### II. МОДЕЛЬ

Нехай напівпровідник, що містить точкові дефекти із середньою концентрацією  $N_{d0}$ , піддається впливу акустичної хвилі. Неоднорідна деформація такого напівпровідникового матеріалу зумовлена двома чинниками: дією акустичної хвилі та неоднорідним перерозподілом точкових дефектів. Вираз для деформації кристалічної ґратки можна записати у вигляді:

$$\varepsilon(x, t) = \varepsilon_0 \cos\left(\omega t - \frac{\omega}{c_l} x\right) + \frac{\theta_d}{K} N_d(x, t), \quad (1)$$

де  $\varepsilon_0$  — амплітуда деформації, зумовленої акустичною хвилею з частотою  $\omega$ ;  $c_l$  — поздовжня швидкість звуку;  $\theta_d = K \Delta\Omega$  — потенціал деформації ( $K$  — модуль пружності,  $\Delta\Omega$  — зміна об'єму кристала одним дефектом). Для міжвузлових атомів та домішок заміщення з йонним радіусом, більшим від йонного радіуса атомів матриці, потенціал деформації  $\theta_d > 0$ , а для вакансій та домішок заміщення з йонним радіусом, меншим від йонного радіуса атомів матриці,  $\theta_d < 0$ .

Знаючи енергію взаємодії точкового дефекту з пружним континуумом

$$W_d(x, t) = -\theta_d \varepsilon(x, t), \quad (2)$$

можна визначити силу, що діє на точковий дефект:

$$F = -\frac{\partial W_d(x, t)}{\partial x} = \theta_d \frac{\partial \varepsilon(x, t)}{\partial x}. \quad (3)$$

Під дією цієї сили, окрім звичайного дифузійного потоку дефектів, виникає додатковий деформаційний потік

$$j_d = vN_d, \quad (4)$$

де  $v = \frac{D\theta_d}{kT} \frac{\partial \varepsilon(x, t)}{\partial x}$  — швидкість дефектів, що виникає за рахунок градієнта деформації в напівпровіднику ( $D$  — коефіцієнт дифузії,  $k$  — стала Больцмана).

З урахуванням (4) рівняння дифузії дефектів запишемо у вигляді:

$$\frac{\partial N_d(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N_d(x, t)}{\partial x^2} - \frac{D\theta_d}{kT} \frac{\partial}{\partial x} \left( N_d(x, t) \frac{\partial \varepsilon(x, t)}{\partial x} \right) + G_d - \frac{N_d(x, t)}{\tau_d}, \quad (5)$$

де  $G_d$  — швидкість генерації точкових дефектів під впливом зовнішніх факторів;  $\tau_d$  — тривалість життя дефектів.

Запишемо концентрацію дефектів у вигляді:

$$N_d(x, t) = N_{d0} + N_{dl}(x, t), \quad (6)$$

де  $N_{dl}(x, t)$  — просторово неоднорідний складник концентрації дефектів.

Браховуючи (1), у наближенні  $N_{dl} \ll N_{d0}$  отримаємо рівняння для  $N_{dl}(x, t)$ :

$$\frac{\partial N_{dl}(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N_{dl}(x, t)}{\partial x^2} - D \frac{N_{d0}}{N_{dc}} \left( \frac{\partial^2 N_{dl}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{K}{\theta} \varepsilon_0 \left( \frac{\omega}{c_l} \right)^2 \cos \left( \omega t - \frac{\omega}{c_l} x \right) \right) + G'_d - \frac{N_{dl}(x, t)}{\tau_d}, \quad (7)$$

де  $N_{dc} = \frac{K \cdot kT}{\theta^2}$ ;  $G'_d = G_d - \frac{N_{d0}}{\tau_d}$  — швидкість генерації точкових дефектів під впливом акустичної хвилі.

Для знаходження розв'язку диференціального рівняння (7) скористаємось інтегральним перетворенням Лапласа:

$$X(x, p) = \int_0^{\infty} N_{dl}(x, t) e^{-pt} dt. \quad (8)$$

Тоді рівняння (7) набере вигляду:

$$pX - N_{dl}(x, 0) = D \left( 1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} \right) \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{G'_d}{p} - \frac{X}{\tau_d} + D \frac{N_{d0}}{N_{dc}} \frac{K}{\theta} \varepsilon_0 \left( \frac{\omega}{c_l} \right)^2 \left( \frac{p}{p^2 + \omega^2} \cos \left( \frac{\omega}{c_l} x \right) + \frac{\omega}{p^2 + \omega^2} \sin \left( \frac{\omega}{c_l} x \right) \right), \quad (9)$$

де  $N_{dl}(x, 0)$  — просторово-неоднорідний складник початкового розподілу концентрації дефектів. Розв'язок диференціального рівняння (9) із забезпеченням його скінченності при  $x \rightarrow \pm\infty$ :

$$X(x, p) = \frac{e^{-\lambda x}}{2\lambda} \int \frac{N_{dl}(x, 0) e^{\lambda x} dx}{D(1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}})} - \frac{e^{\lambda x}}{2\lambda} \int \frac{N_{dl}(x, 0) e^{-\lambda x} dx}{D(1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}})} + \frac{G'_d}{pD\lambda^2(1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}})} + \frac{\frac{N_{d0}}{N_{dc}} K}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}}} \frac{\varepsilon_0 \left( \frac{\omega}{c_l} \right)^2}{\theta \left( \frac{\omega}{c_l} \right)^2 + \lambda^2} \left( \frac{p}{p^2 + \omega^2} \cos \left( \frac{\omega}{c_l} x \right) + \frac{\omega}{p^2 + \omega^2} \sin \left( \frac{\omega}{c_l} x \right) \right), \quad (10)$$

$$\text{де } \lambda = \sqrt{\frac{p + \frac{1}{\tau_d}}{D(1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}})}}.$$

Здійснивши обернене перетворення Лапласа, отримаємо просторово-часовий перерозподіл точкових дефектів під впливом акустичної хвилі. Для рівномірного початкового розподілу точкових дефектів ( $N_{dl}(x, 0) = 0$ ) одержимо:

$$N_{dl}(x, t) = G'_d \tau_d \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_d}} \right) + \frac{D \frac{N_{d0}}{N_{dc}} K \varepsilon_0 \left( \frac{\omega}{c_l} \right)^2}{\theta \sqrt{\frac{1}{\tau_d^2} + \omega^2}} \left( \sin \left( \omega t - \frac{\omega}{c_l} x + \delta \right) + e^{-\frac{t}{\tau_d}} \sin \left( \frac{\omega}{c_l} x - \delta \right) \right), \quad (11)$$

$$\text{де } \delta = \arctg \frac{1}{\omega \tau_d},$$

$$\frac{1}{\tau_d} = D \left( 1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}} \right) \left( \frac{\omega}{c_l} \right)^2 + \frac{1}{\tau_d}. \quad (12)$$

**III. ЧИСЛОВІ РОЗРАХУНКИ  
ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ**

На рис. 1 зображено просторовий перерозподіл точкових дефектів  $N_{dl}(x)$  під впливом акустичної хвилі в різні моменти часу. Числові розрахунки проводили для таких значень параметрів:  $\omega = 6.28 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ ;  $\epsilon_0 = 0.0001$ ;  $K = 6500 \text{ eВ/нм}^{-3}$ ;  $c_l = 3500 \text{ м/с}$ ;  $\theta = 5 \text{ eВ}$  [8];  $D = 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ ;  $\tau_d = 0.001 \text{ мс}$ .

Під впливом зовнішньої періодичної неоднорідної деформації в напівпровідниковому матеріалі, окрім градієнтного потоку, виникає додатковий деформаційний потік дефектів, що спричиняє формування періодичних дефектно-деформаційних структур з періодом, що дорівнює довжині хвилі. Величина  $\tau_\omega$  (формула (12)) визначає тривалість життя дефекту в напівпровіднику, що піддається впливу акустичної хвилі і залежить від її частоти та середньої концентрації точкових дефектів. Як видно з формули (12), дія акустичної хвилі приводить до зменшення тривалості життя точкових дефектів, тобто до збільшення їхнього коефіцієнта дифузії [9], що спостерігалось в експериментальних роботах [2, 6]. Зі збільшенням частоти акустичної хвилі коефіцієнт дифузії дефектів квадратично зростає.

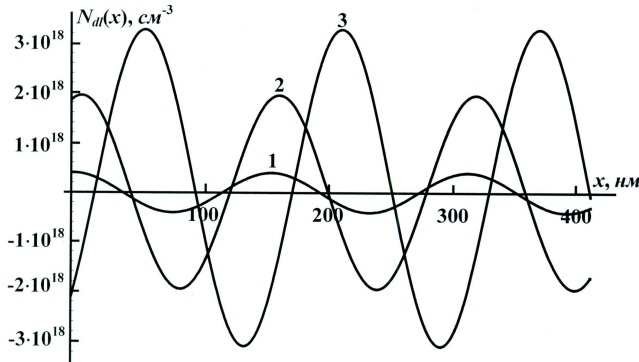


Рис. 1. Просторовий перерозподіл точкових дефектів під впливом акустичної хвилі в різні моменти часу: **1** —  $\frac{t}{\tau_d} = 10^{-5}$ ; **2** —  $\frac{t}{\tau_d} = 2 \cdot 10^{-5}$ ; **3** —  $\frac{t}{\tau_d} = 10^2$ .

На рис. 2 показано результати розрахунків просторового перерозподілу точкових дефектів  $N_{dl}(x)$  при різних значеннях їхньої середньої концентрації для  $t \gg \tau_d$ . Розрахунки проводили для концентрації точкових дефектів із діапазону  $N_{d0} < N_{dc}$ , оскільки при більших концентраціях суттєвою є нелінійна взаємодія точкових дефектів із пружним полем деформації

[8], що не враховувалася в межах цієї моделі. Як бачимо з рис. 2, амплітуда зміни концентрації точкових дефектів зростає зі збільшенням їхньої середньої концентрації. Причому точкові дефекти, які є центрами розтягу ( $\theta_d > 0$ ), накопичуються в областях напівпровідникового матеріалу, що піддається деформації розтягу, і навпаки, дефекти виду центрів стиску, наприклад, вакансії ( $\theta_d < 0$ ), накопичуються в областях напівпровідника, що піддається в цей момент часу деформації стиску під впливом акустичної хвилі. Звичайно, після припинення дії акустичної хвилі відбуватиметься повернення до початкового розподілу. Однак такі процеси будуть набагато повільнішими, оскільки коефіцієнт дифузії дефектів за відсутності акустичної хвилі є значно меншим.

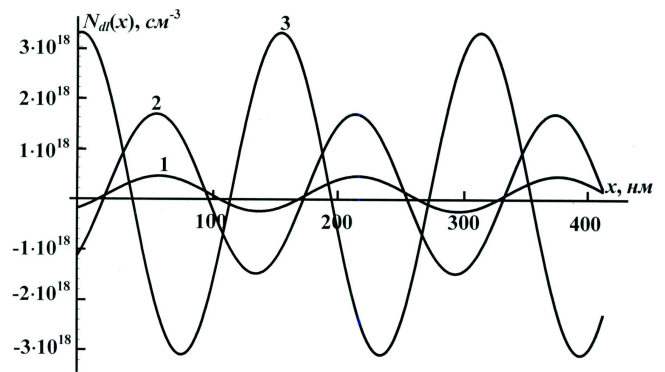


Рис. 2. Просторовий перерозподіл точкових дефектів під впливом акустичної хвилі при різних значеннях їхньої середньої концентрації: **1** —  $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.1$ ; **2** —  $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.45$ ; **3** —  $\frac{N_{d0}}{N_{dc}} = 0.9$ .

Окрім цього, неоднорідна деформація приводить до локального зміщення дна зони провідності (вершини валентної зони):

$$\Delta E_{c(v)} = a_{c(v)}\epsilon,$$

де  $a_{c(v)}$  — константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності (валентної зони). Таке зміщення залежить від середньої концентрації точкових дефектів і відображається на спектрах фотолюмінесценції та вольт-амперних характеристиках напівпровідникових структур, що піддаються впливу акустичної хвилі [6]. За відповідними змінами спектрів фотолюмінесценції та вольт-амперних характеристик під дією акустичної хвилі можна оцінити концентрацію дефектів.

[1] Б. Н. Заверюхин, Н. Н. Заверюхина, О. М. Турсункулов, Письма журн. тех. физ. **28**, 1 (2002).  
 [2] О. Я. Олих, И. В. Островский, Физ. тверд. тела **44**, 1198 (2002).  
 [3] S. Ostapenko, R. Bell, J. Appl. Phys. **77**, 5458 (1995).

[4] П. Б. Парчинский, С. И. Власов, Л. Г. Лигай, О. Ю. Шукина, Письма журн. тех. физ. **29**, 83 (2003).  
 [5] И. В. Островский, А. Б. Надточий, А. А. Подолян, Физ. техн. полупр. **36**, 389 (2002).  
 [6] И. Б. Ермолович, В. В. Миленин, Р. В. Конакова,

- Л. Н. Применко, И. В. Прокопенко, В. Л. Громашевский, Физ. техн. полупр. **31**, 503 (1997).  
[7] Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Атомиздат, Москва, 1972).  
[8] V. I. Emel'yanov, I. M. Panin, *Laser Physics* **6**, 971 (1996).  
[9] Б. И. Болтакс, *Диффузия в полупроводниках* (Физматгиз, Москва, 1961).

**THE FORMATION OF THE PERIODIC DEFECT STRUCTURES  
IN SEMICONDUCTORS UNDER THE INFLUENCE  
OF AN ACOUSTIC WAVE**

R. M. Peleshchak, O. O. Dan'kiv, O. V. Kuzyk  
*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,  
24, Ivan Franko St., Drohobych, Lviv Region, 82100  
e-mail: peleshchak@rambler.ru*

The deformation-diffusion model of space-time redistribution of dot defects under the influence of an acoustic wave is constructed. The offered theory considers the deformation, created by an acoustic wave and dot defects. It is shown that under the influence of an acoustic wave the periodic defect-deformation structures with the period equaling the length of a wave are formed in the semiconductor.