

## ДИFUЗІЙНО-ДЕФОРМАЦІЙНА ТЕОРІЯ ФОРМУВАННЯ САМООРГАНІЗОВАНИХ НАНОКЛАСТЕРІВ ІМПЛАНТОВАНИХ ДОМІШОК

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

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

(Отримано 28 серпня 2012 р.; в остаточному вигляді — 04 квітня 2013 р.)

Розвинуто нелінійну дифузійно-деформаційну теорію самоорганізації нанокластерів імплантованих домішок, яка враховує пружну взаємодію імплантованих домішок між собою та з атомами матриці. У межах цієї теорії встановлено критерії формування нанокластерів імплантованих домішок. Визначено характеристичну довжину взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці та розмір нанокластера залежно від середньої концентрації домішок.

**Ключові слова:** самоорганізація, імплантація, дифузія, деформація, нанокластер.

PACS number(s): 61.46.–w, 66.30.Pa

### I. ВСТУП

Одним із нових напрямків використання йонної імплантації є синтез нанокластерів у діелектричних [1, 2] та напівпровідникових матрицях [3]. Формування нанокластерів домішкових атомів у напівпровідниковій кристалічній матриці зі заданою концентрацією та структурою є принципово новим підходом в отриманні нанорозмірних структур. Наприклад, альтернативним для наявного методу молекулярно-променевої епітаксії створення гетероструктур Si/Ge з квантовими точками Ge є дешевшим методом йонної імплантації, який дає змогу отримувати нанокластери у всьому об'ємі кристалу, керувати їх розмірами та структурою [4].

На сьогодні опубліковано низку теоретичних праць, присвячених самоорганізації в процесі росту кристалів [5–7], за ядерного й лазерного опромінення [8–10], які можуть бути певним чином використані і для розвитку теорії самоорганізації при формуванні нанорозмірних упорядкованих структур в імплантованих напівпровідниках.

У цій роботі побудовано дифузійно-деформаційну теорію формування самоорганізованих нанокластерів імплантованих домішок.

Нелінійна взаємодія імплантованих домішок із самоузгодженим полем механічної деформації, зумовленої наявністю цих домішок, приводить до утворення впорядкованих структур — кластерів. Домішка, яка потрапляє в матрицю, спричиняє зміну 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 приводять до самоорганізації кластерів домішок.

### II. МОДЕЛЬ

Розглянемо сферично-симетричну дефектно-кристалічну систему, у центрі якої ( $r = 0$ ) внаслідок нелінійної взаємодії домішок через пружне поле формується кластер цих домішок. Радіус імплантованої матриці  $R_0 \gg l_d$ , де  $l_d$  — середня довжина вільного пробігу домішки.

Потенціальну енергію пружної взаємодії імплантованої домішки можна записати у вигляді:

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

де перший доданок визначає енергію взаємодії домішок, а другий — домішок з атомами кристалічної матриці.

Пружні сили, що виникають у результаті наявності домішки ненульового об'єму, виконують роботу зі зміни об'єму кристалічної матриці:

$$A = -\sigma_{rr} \Delta\Omega_d, \quad (2)$$

де  $\Delta\Omega_d$  — зміна об'єму кристала однією домішкою;  $\sigma_{rr}$  — радіальний складник тензора механічної напруги в кристалі, яка виникає за рахунок взаємодії домішки з пружним полем матриці  $\varepsilon_{rr} = \varepsilon = \frac{\partial u_r}{\partial r}$ ;  $\varepsilon_{rr}$  та  $u_r$  — радіальні компоненти тензора деформації та вектора зміщень відповідно.

Пружні поля імплантованих домішок, зміщуючи атоми в околі інших домішок, створюють сили, що діють на них і є причиною їхньої пружної взаємодії. Енергія цієї взаємодії зменшується за степеневим законом і є досить великою, якщо домішки сильно спотворюють кристалічну ґратку [11]. У роботі [11] показано, що така енергія пружної взаємодії дефектів в ізотропних тілах дорівнює нулеві. Але поряд із пружною взаємодією дефектів, яка зменшується з відстанню за степеневим законом, наявна взаємодія, яка плавно змінюється на відстанях порядку розміру кристала й пов'язана із силами дзеркального зображення, прикладеними до поверхні кристала [11]. Така енергія  $U_{dd}^{\text{int}}$  взаємодії імплантованої домішки, що

знаходиться в положенні  $r'$ , з іншими домішками з концентрацією  $N(r)$  практично не залежить від положення домішки  $r'$  і може бути визначена так [11]:

$$U_{dd}^{\text{int}}(r) = -\frac{2}{3}K \frac{1-2\nu}{1-\nu} N(r) \Delta\Omega_d^2, \quad (3)$$

$K$  — модуль усебічного стиску;  $\nu$  — коефіцієнт Пуассона.

З урахуванням (2) та нелокального закону Гука [12] енергію взаємодії імплантованої домішки з атомами матриці через пружне поле можна визначити так:

$$U_{da}^{\text{int}}(r) = - \int \lambda (|r' - r|) \varepsilon(r') \Delta\Omega_d dr', \quad (4)$$

де  $\lambda$  — оператор пружних модулів [12]. Увівши змінну

$\tau = r' - r$  та розклавши в ряд Тейлора за  $\tau$ , отримаємо:

$$\begin{aligned} U_{da}^{\text{int}}(r) &= - \int \lambda (|\tau|) \varepsilon(r + \tau) \Delta\Omega_d d\tau \\ &= - \int \lambda (|\tau|) \left( \varepsilon(r) + \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} \frac{\tau^2}{2} \right) \Delta\Omega_d d\tau \quad (5) \\ &= -K_d \varepsilon(r) \Delta\Omega_d - K_d \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d, \end{aligned}$$

де  $K_d = \int \lambda (|\tau|) d\tau \equiv K$  — модуль усебічного стиску [13];  $2r_{da}^2 = \frac{\int \lambda (|\tau|) \tau^2 d\tau}{\int \lambda (|\tau|) d\tau}$  — середнє значення квадрата відстані між імплантованою домішкою та атомами матриці.

Пружне поле, що виникає в імплантованій матриці, діє на домішку із силою

$$\mathbf{F} = -\text{grad } U_i = K \text{grad} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N(r) \Delta\Omega_d^2 + \varepsilon(r) \Delta\Omega_d + \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right). \quad (6)$$

Під дією цієї сили домішки у пружному полі отримують швидкість

$$\mathbf{v} = \mu \mathbf{F} = \frac{DK}{k_B T} \text{grad} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} N(r) \Delta\Omega_d^2 + \varepsilon(r) \Delta\Omega_d + \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right), \quad (7)$$

де  $D$  — коефіцієнт дифузії;  $T$  — температура;  $k_B$  — стала Больцмана. Тут для визначення рухливості домішок використано співвідношення Айнштайна.

Як бачимо з формули (7), швидкість домішок у пружному полі визначається градієнтами деформації й концентрації дефектів та зміною об'єму кристала цими домішками. Аналіз цієї формули показує, що градієнт концентрації створює деформаційний потік, який напрямлений, на відміну від звичайного дифузійного потоку, в бік збільшення концентрації домішок (перший доданок). Окрім цього, домішки, які є центрами розтягу ( $\Delta\Omega_d > 0$ ), рухатимуться в область, що зазнає відносного розтягу, а домішки, які є центрами стиску ( $\Delta\Omega_d < 0$ ), рухатимуться в область, що зазнає відносного стиску (другий доданок).

З урахуванням (7) стаціонарний потік імплантованих домішок можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} j &= -D \frac{\partial N}{\partial r} + N \frac{DK}{k_B T} \left( \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\partial N}{\partial r} \Delta\Omega_d^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \Delta\Omega_d + \frac{\partial^3 \varepsilon}{\partial r^3} r_{da}^2 \Delta\Omega_d \right) - v_0 N, \quad (8) \end{aligned}$$

де  $v_0$  — швидкість зсуву поверхні кристала внаслідок розпилення йонами [14], що налітають.

Густину потенціальної енергії пружного континууму без домішок з урахуванням ангармонічних доданків можна представити так:

$$\begin{aligned} U_a &= \frac{1}{2} K \varepsilon^2(r) + \frac{1}{3} K \alpha \varepsilon^3(r) + \frac{1}{4} K \beta \varepsilon^4(r) \\ &\quad + K a_0^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} \varepsilon(r), \quad (9) \end{aligned}$$

де  $\alpha, \beta$  — константи пружного ангармонізму;  $a_0$  — характеристична відстань взаємодії атомів кристалічної матриці, яка приблизно дорівнює параметру кристалічної ґратки матриці.

Тоді з урахуванням (1), (3), (5) та (9) вираз для густини вільної енергії кристала з імплантованими домішками матиме вигляд:

$$\Phi = U_a + N U_i - T S = \frac{1}{2} K \varepsilon^2(r) + \frac{1}{3} K \alpha \varepsilon^3(r) + \frac{1}{4} K \beta \varepsilon^4(r) + K a_0^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(r)}{\partial r^2} \varepsilon(r)$$

$$-\frac{1}{3}K\frac{1-2\nu}{1-\nu}N^2(r)\Delta\Omega_d^2 - KN(r)\varepsilon(r)\Delta\Omega_d - KN(r)\frac{\partial^2\varepsilon(r)}{\partial r^2}r_{da}^2\Delta\Omega_d - TS, \quad (10)$$

де  $S$  – густина ентропії.

Використавши співвідношення  $\sigma_{rr} \equiv \sigma = \frac{\partial\Phi}{\partial\varepsilon_{rr}} \equiv \frac{\partial\Phi}{\partial\varepsilon}$  [13], отримаємо вираз для механічної напруги в імплантованій кристалічній матриці:

$$\begin{aligned} \sigma &= K\varepsilon + K\alpha\varepsilon^2 + K\beta\varepsilon^3 + Ka_0^2\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial r^2} - \frac{2}{3}K\frac{1-2\nu}{1-\nu}N\frac{\partial N}{\partial\varepsilon}\Delta\Omega_d^2 - KN\Delta\Omega_d \\ &- K\frac{\partial N}{\partial\varepsilon}\varepsilon(r)\Delta\Omega_d - K\frac{\partial N}{\partial\varepsilon}\frac{\partial^2\varepsilon(r)}{\partial r^2}r_{da}^2\Delta\Omega_d. \end{aligned} \quad (11)$$

З умови рівноваги деформованого тіла  $\frac{\partial\sigma}{\partial r} = 0$  одержимо рівняння для деформації:

$$\begin{aligned} K\frac{\partial\varepsilon}{\partial r}\left(1 - \frac{\partial N}{\partial\varepsilon}\Delta\Omega_d\right) + K\alpha\frac{\partial(\varepsilon^2)}{\partial r} + K\beta\frac{\partial(\varepsilon^3)}{\partial r} + K\frac{\partial^3\varepsilon}{\partial r^3}\left(a_0^2 - \frac{\partial N}{\partial\varepsilon}r_{da}^2\Delta\Omega_d\right) \\ - K\frac{\partial N}{\partial r}\left(\frac{2}{3}\frac{1-2\nu}{1-\nu}\frac{\partial N}{\partial\varepsilon}\Delta\Omega_d^2 + \Delta\Omega_d\right) = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Запишімо концентрацію домішок та деформацію матриці так:

$$N(r) = N_1(r) + N_0, \quad (13)$$

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_1(r) + N_0\Delta\Omega_d, \quad (14)$$

де  $N_0 = -\frac{j}{v_0}$ . Знак “–” указує на те, що потік домішок та швидкість зсуву поверхні кристала внаслідок розпилення налітаючими йонами напрямлені у протилежні боки.

Підставивши (13) і (14) у (8) та (12) з врахуванням того, що  $N_1(r) \ll N_0$  та при  $r \rightarrow R_0$  повинні виконуватись умови  $\frac{\partial N_1}{\partial r} = 0$  та  $\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial r} = 0$ , отримаємо рівняння для  $N_1(r)$  та  $\varepsilon_1(r)$ :

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

$$\begin{aligned} K\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial r}\left(1 - \frac{\partial N_1}{\partial\varepsilon_1}\Delta\Omega_d\right) + K\alpha\left(2N_0\Delta\Omega_d\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial r} + \frac{\partial(\varepsilon_1^2)}{\partial r}\right) + K\beta\left(3(N_0\Delta\Omega_d)^2\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial r} + 3N_0\Delta\Omega_d\frac{\partial(\varepsilon_1^2)}{\partial r} + \frac{\partial(\varepsilon_1^3)}{\partial r}\right) \\ + K\frac{\partial^3\varepsilon_1}{\partial r^3}\left(a_0^2 - \frac{\partial N_1}{\partial\varepsilon_1}r_{da}^2\Delta\Omega_d\right) - K\frac{\partial N_1}{\partial r}\left(\frac{2}{3}\frac{1-2\nu}{1-\nu}\frac{\partial N_1}{\partial\varepsilon_1}\Delta\Omega_d^2 + \Delta\Omega_d\right) = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Проінтегрувавши рівняння (15), одержимо:

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

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

Значення константи  $N_0$  можна знайти з умови:

$$\int_V N(r)dV = Q, \quad (18)$$

де  $V$  – об’єм імплантованої матриці;  $Q$  – кількість домішок у матриці.

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 так:

$$\frac{\partial^2\varepsilon_1}{\partial r^2} - a\varepsilon_1 + f\varepsilon_1^2 - c\varepsilon_1^3 = 0, \quad (19)$$

де

$$a = \frac{1 - 2\gamma - 2\delta\gamma^2 - 2|\alpha| \frac{k_B T \gamma}{K \Delta \Omega_d (1 + \delta\gamma)} + 3\beta \left( \frac{k_B T \gamma}{K \Delta \Omega_d (1 + \delta\gamma)} \right)^2}{2r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{a_0^2}{2r_{da}^2} \right)}; \quad f = \frac{|\alpha| - 3\beta \frac{k_B T \gamma}{K \Delta \Omega_d (1 + \delta\gamma)}}{2r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{a_0^2}{2r_{da}^2} \right)};$$

$$c = \frac{\beta}{2r_{da}^2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{a_0^2}{2r_{da}^2} \right)}; \quad \delta = \frac{1}{3} \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu}; \quad \gamma = \frac{N_0/N_c}{1 - \frac{2}{3} \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} N_0/N_c}.$$

Тут ураховано, що  $\alpha < 0$ ,  $\beta > 0$  [13].

### III. ОТРИМАНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розв'язок рівняння (19) має вигляд:

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

Зробивши заміну  $\varepsilon_1 = \frac{1}{z}$ , цей інтеграл можна записати так:

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

де  $\Delta = -\frac{f^2}{9a} + \frac{c}{2}$ .

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  $0 < \gamma < \gamma_c$  ( $\gamma_c = -\frac{1}{2\delta} + \sqrt{\frac{1}{4\delta^2} + \frac{a_0^2}{2\delta r_{da}^2}}$ ), то інтеграл (20) не виражається в дійсних функціях, а отже  $\varepsilon_1 = 0$ , а  $N(r) = N_0$ , тобто процеси самоорганізації не відбуваються.

За перевищення 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 (19) матиме вигляд:

$$\varepsilon_1(r) = \text{sign } \Delta \Omega_d \frac{A}{B + \text{sh}(-\sqrt{ar})}, \quad \gamma_c < \gamma < \gamma_{c1},$$

$$(a > 0, \Delta > 0); \quad (21)$$

$$\varepsilon_1(r) = \text{sign } \Delta \Omega_d \frac{A}{B + \text{ch}(\sqrt{ar})}, \quad \gamma_{c1} < \gamma < \gamma_{c2},$$

$$(a > 0, \Delta < 0); \quad (22)$$

$$\varepsilon_1(r) = \text{sign } \Delta \Omega_d \frac{A}{B + \sin(\sqrt{|a|r})}, \quad \gamma > \gamma_{c2},$$

$$(a < 0, \Delta > 0), \quad (23)$$

де  $\gamma_{c1} \approx \frac{1}{2} - \frac{\alpha^2}{9\beta}$ ,  $\gamma_{c2} \approx \frac{1}{2}$ ,  $A = 3\sqrt{2}|\alpha|(|9ca - 2f^2|)^{-\frac{1}{2}}$ ,  $B = \sqrt{2}f(|9ca - 2f^2|)^{-\frac{1}{2}}$ .

Таким чином, при  $\gamma_c < \gamma < \gamma_{c2}$  формуються кластери імплантованих домішок, радіус яких можна визначити так:

$$d = \frac{1}{\sqrt{a}} = r_{da} \sqrt{\frac{2 \left( \delta\gamma^2 + \gamma - \frac{a_0^2}{2r_{da}^2} \right)}{1 - 2\gamma - 2\delta\gamma^2 - 2|\alpha| \frac{k_B T \gamma}{K \Delta \Omega_d (1 + \delta\gamma)} + 3\beta \left( \frac{k_B T \gamma}{K \Delta \Omega_d (1 + \delta\gamma)} \right)^2}}. \quad (24)$$

При  $\gamma > \gamma_{c2}$  утворюються періодичні домішкові структури з періодом  $\frac{2\pi}{\sqrt{|a|}}$ . Розмір кластера в основному визначається характеристичною відстанню взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці  $r_{da}$ , а також параметром  $\gamma$  (середньою концентрацією до-

мішок), пружними сталими матеріалу імплантованої матриці, температурою та зміною об'єму кристала однією домішкою  $\Delta \Omega_d$ . Очевидно, що характеристична відстань взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці  $r_{da}$  залежить від концентрації домішок, тобто

від параметра  $\gamma$ , і може бути оцінена з графіка залежності вільної енергії пружно-деформованого кристала від величини  $r_{da}$ . Оскільки всі необоротні процеси, які відбуваються при сталій температурі, супроводжуються зменшенням вільної енергії, то розташування домішок у досліджуваній системі відповідатиме такому значенню  $r_{da}$ , при якому вільна енергія є мінімальною [15]. На рис. 1 показано залежність середнього значення густини вільної енергії  $\bar{\Phi}(r_{da})$  від характеристичної відстані взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці  $r_{da}$  при різних значеннях параметра  $\gamma$  та коефіцієнта пружного ангармонізму  $\alpha$ , де  $\bar{\Phi}(r_{da}) = \frac{1}{V} \int_V \Phi(r, r_{da}) dV$ . Причому до уваги брали тільки ті доданки (10), які залежать від  $r_{da}$ . Розрахунки проводили при таких значеннях параметрів:  $T = 300^\circ\text{C}$ ;  $\Delta\Omega_d = 0.125 \text{ нм}^3$ ;  $a_0 = 0.5 \text{ нм}$ ;  $K = 450 \text{ еВ/нм}^3$ ;  $\nu = 0.35$ ;  $R_0 = 0.5 \text{ мкм}$ ;  $\frac{\alpha^2}{\beta} = 2$  [13].

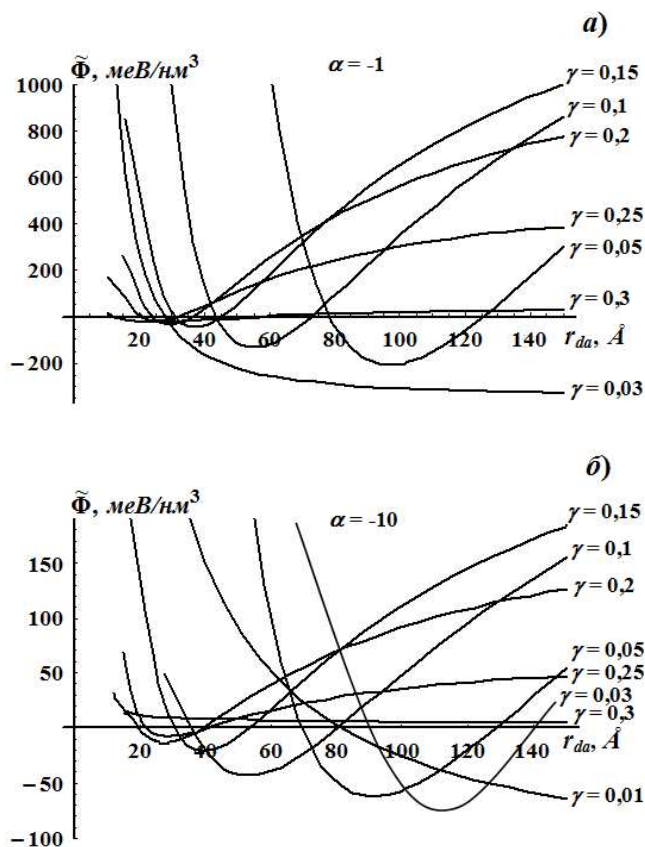


Рис. 1. Залежність середнього значення густини вільної енергії від характеристичної відстані взаємодії імплантованих домішок.

Аналіз залежності  $\bar{\Phi}(r_{da})$  дає змогу встановити, чи є в цій системі термодинамічна тенденція до коалесценції. За малих значень параметра  $\gamma$  ( $\gamma < 0.02$ ) мінімум вільної енергії відповідає домішковій структурі, для якої характеристична відстань взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці  $r_{da}$  прямує до безмежності. А отже, й розмір кластера (рис. 2) також буде нескінченно великим. Це означає, що енергетично вигідним є об'єднання всіх кластерів в один,

тобто в системі є тенденція до коалесценції. Зі збільшенням параметра  $\gamma$  в діапазоні  $0.05 \leq \gamma \leq 0.25$  мінімум енергії досягається за певних оптимальних значень характеристичної відстані взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці. У цьому випадку об'єднання кластерів домішок не є енергетично вигідним і тенденція до коалесценції відсутня. При  $\gamma \geq 0.3$  мінімум вільної енергії незначний (рис. 1, а) або взагалі відсутній (рис. 1, б). У цьому випадку система знову стає нестійкою до коалесценції.

На рис. 2 показано залежність розміру кластера імплантованих домішок від величини їх відносної середньої концентрації. У діапазоні  $0.05 \leq N_0/N_c \leq 0.2$  розмір нанокластера практично не змінюється зі збільшенням концентрації домішок. Це пов'язано з тим, що зі збільшенням концентрації домішок розмір кластера зростає, але одночасно зменшується характеристична відстань взаємодії домішок з атомами матриці, що компенсує дію першого фактора. Тому можна очікувати, що за наявності домішок із концентрацією з діапазону  $0.05 \leq \frac{N_0}{N_c} \leq 0.2$  формуватимуться однорідні за розмірами нанокластери. За межами цього діапазону незначна зміна концентрації домішок приводить до суттєвої зміни розміру нанокластера (рис. 2). Тому при імплантації домішок із середньою концентрацією  $N_0 < 0.05N_c$  та  $N_0 > 0.25N_c$  очікуваною є велика дисперсія розміру нанокластера.

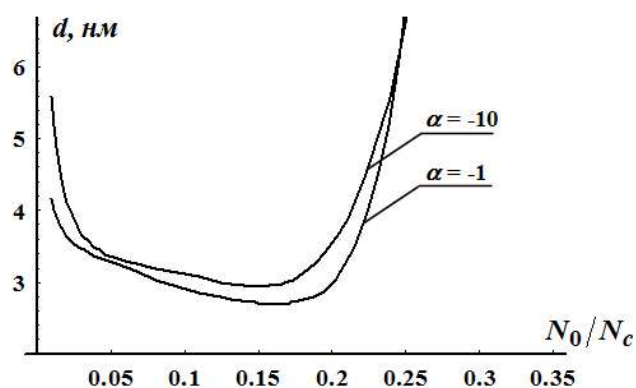


Рис. 2. Залежність розміру кластера імплантованих домішок від величини їх відносної концентрації.

Величина  $N_c$  залежить від температури, пружних сталей імплантованої матриці та зміни об'єму кристала однією домішкою  $\Delta\Omega_d$ . У випадку, якщо домішка заміщує атом матриці, то  $\Delta\Omega_d = \frac{4}{3}\pi(r_i^3 - r_0^3)$ , де  $r_i$ ,  $r_0$  — йонний радіус домішки та атома матриці відповідно. Якщо ж домішка є в міжвузлі, то збільшення об'єму кристала  $\Delta\Omega_d = a_i^3$  [16], де  $a_i$  — параметр ґратки кристалічної матриці. У цьому випадку  $N_c$  приймає значення з діапазону  $10^{18} \text{ см}^{-3} < N_c < 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Якщо домішка заміщує атом матриці, то  $N_c > 10^{19} \text{ см}^{-3}$  і суттєво залежить від різниці йонних радіусів домішки та атома матриці. Якщо йонні радіуси відрізняються мало, то значення  $N_c$  є практично недосяжним і в цьому випадку процеси самоорганізації відсутні.

Розрахунки вільної енергії (рис. 1) та розміру кластера (рис. 2) проводили при двох значеннях константи пружного ангармонізму:  $\alpha = -1$  та  $\alpha = -10$ . Константу пружного ангармонізму  $\alpha$  можна визначити через температурний коефіцієнт лінійного розширення  $\alpha_p$ :  $\alpha = -\alpha_p \cdot E \cdot a_0^3 / k_B$  [17], де  $E$  — модуль Юнга. Для матеріалів GaAs, InAs, GaSb, InSb, ZnS  $\alpha \sim -10$ ; для Si, SiO<sub>2</sub>  $\alpha \sim -1$ . За більших значень константи пружного ангармонізму процеси самоорганізації розпочинаються при менших значеннях відносної концентрації домішок. Зокрема, при  $\alpha = -10$  і  $\gamma = 0.03$  мінімум вільної енергії досягається при значенні  $r_{da} = 11.2$  нм, а при  $\alpha = -1$  і  $\gamma = 0.03$  характеристична відстань

взаємодії імплантованих домішок з атомами матриці  $r_{da}$  прямує до безмежності.

Отже, у статті розвинуто нелінійну дифузійно-деформаційну теорію самоорганізації нанокластерів в імплантованій матриці, яка враховує пружну взаємодію імплантованих домішок між собою та з атомами матриці. Звичайно, запропонована модель дає уявлення про просторове розташування нанокластерів домішок тільки в межах центрально-сферичної симетрії. Однак ця теорія дає змогу встановити критерії формування нанокластерів та розмір нанокластера залежно від середньої концентрації домішок.

- 
- [1] I. Yamada, J. Matsuo, N. Tojoda, Phys. Rev. B **206**, 820 (2003).
- [2] А. В. Боряков *и др.*, Физ. тверд. тела **54**, 370 (2012).
- [3] Ю. Н. Пархоменко, А. С. Белогорохов, И. Н. Герасименко, А. В. Иржак, М. Г. Лисаченко, Физ. техн. полупр. **38**, 593 (2004).
- [4] Н. Н. Герасименко, В. Ю. Троицкий, А. А. Валяев, М. Н. Павлюченко, К. К. Джаманбалин, Перспективные материалы **5**, 26 (2002).
- [5] Н. Н. Леденцов *и др.*, Физ. техн. полупр. **32**, 385 (1998).
- [6] J. Tersoff, Phys. Rev. B **56**, R4394 (1997).
- [7] I. P. Ipatova, V. G. Malyshkin, A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **57**, 968 (1998).
- [8] В. В. Михайловский, К. С. Расселл, В. И. Сугаков, Физ. тверд. тела **42**, 471 (2000).
- [9] В. И. Емельянов, А. В. Рогачева, Квант. электрон. **34**, 531 (2004).
- [10] F. Kh. Mirzade, K. R. Alakverdiev, Z. Yu. Salaeva, J. Nanosci. Nanotechnol. **8**, 764 (2008).
- [11] М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Наукова думка, Киев, 1983).
- [12] И. А. Кунин, *Теория упругих сред с микроструктурой. Нелокальная теория упругости* (Наука, Москва, 1975).
- [13] В. И. Емельянов, И. М. Панин, Физ. тверд. тела **39**, 2029 (1997).
- [14] Г. Л. Фалько, С. Г. Шпирко, Укр. фіз. журн. **40**, 1115 (1995).
- [15] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика. Ч. 1* (Наука, Москва, 1976).
- [16] А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки* (Вища школа, Харків, 1988).
- [17] А. И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников* (Мир, Москва, 1978).

## DIFFUSION-DEFORMATION THEORY OF THE FORMATION OF SELF-ASSEMBLED NANOCLUSTERS OF THE IMPLANTED IMPURITIES

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

The non-linear diffusion-deformation theory of the self-organization of nanoclusters of the implanted impurities which considers elastic interaction of the implanted impurities among themselves and with the atoms of a matrix is developed. Within this theory criteria of the formation of nanoclusters of the implanted impurities are established. The characteristic length of interaction of the implanted impurities with the atoms of a matrix and the size of a nanocluster depending on an average impurity concentration are defined.