

# Концентрационно-упругие неустойчивости распределения ионов и нейтральных частиц в изолирующем слое на поверхности полупроводника

© Е.И. Гольдман<sup>†</sup>

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,  
141190 Фрязино, Россия

(Получена 10 октября 2005 г. Принята к печати 20 февраля 2006 г.)

В диэлектрических пленках, изолирующих полупроводник от металлического электрода, присутствуют подвижные примеси в виде ионов и нейтральных образований. При достаточно высоких температурах и поляризующих электрических полях примеси концентрируются у границы раздела изолятор–полупроводник, где обмениваются электронами с полупроводником. Показано, что парное взаимодействие частиц через поле упругих напряжений, связанных с концентрационным расширением изолятора, может приводить к неустойчивости однородного вдоль контакта распределения примеси. В растворе точечных дефектов возникает стационарное мелкомасштабное упорядочение частиц вдоль контакта изолятора с полупроводником, что сопровождается кольцевыми потоками частиц.

PACS: 68.55.Ln, 73.20.Nb, 73.40.Qv

## 1. Введение

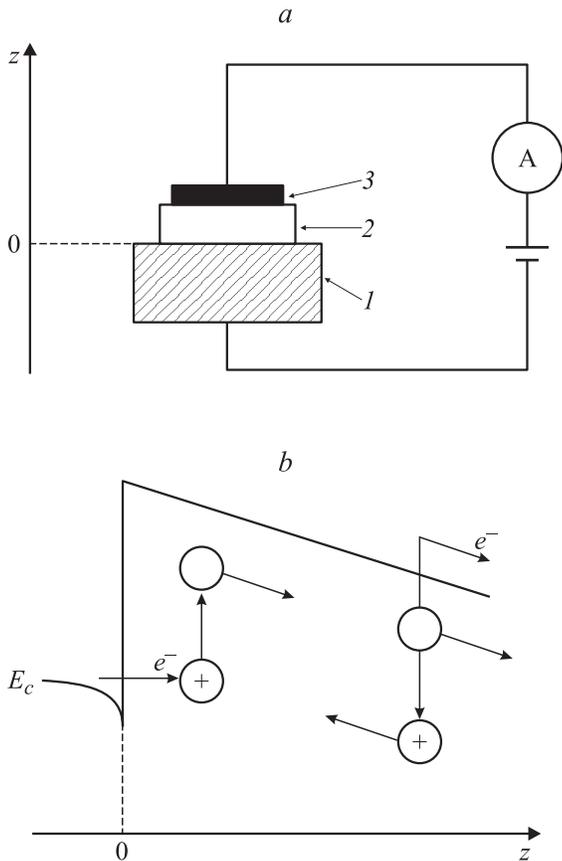
В диэлектрических пленках, изолирующих полупроводник от металлического электрода, присутствуют точечные дефекты: частицы примесей — в виде ионов и нейтральных образований, обрывы связей и др. С ростом температуры некоторые дефекты становятся подвижными и при создании соответствующих условий (достаточно высокие температуры, внешние электрические поля) могут скапливаться у одной из поверхностей изолятора, где их концентрация становится настолько большой, что начинают проявляться эффекты взаимодействия дефектов между собой. Известно, что в твердых растворах полупроводников возникают структуры с модулированным составом (спинодальный распад, [1]). Возникновение такой модуляции обусловлено неустойчивостью однородного твердого раствора относительно флуктуаций его состава (спинодальная неустойчивость). Современная теория [2], построенная с учетом анизотропии кристаллической решетки, объясняет неустойчивость конкуренцией двух процессов: взаимного притяжения частиц одной фазы и их отталкивания, связанного с упругими напряжениями, вызванными концентрационным расширением полупроводника [3]. Естественно, подобные явления могут иметь место и в случае твердого раствора дефектов с достаточно сильным взаимным притяжением.

Однако раствор подвижных точечных дефектов у границы раздела (ГР) с полупроводником может иметь специфические свойства по сравнению с равновесной смесью различных веществ. Например, если примесь существует в изоляторе и как ион, и как нейтральное образование, стационарное состояние раствора такого рода дефектов может быть неравновесным. Данная ситуация возникает, если разрешены электронные переходы между разрешенной зоной полупроводника и

состояниями на подвижных примесных центрах в изоляторе. В достаточно больших поляризующих полях ионы концентрируются в ГР диэлектрик–полупроводник. При этом происходит их нейтрализация за счет туннельных переходов электронов из поверхностного слоя обогащения полупроводника на локализованные состояния и обратно (см. рис. 1). Нейтрализованные примеси диффундируют в глубь изолятора, где термически распадаются на ионы и электроны. Последние практически мгновенно по сравнению со временами ионного переноса уходят на металлический электрод. Вновь образовавшиеся ионы под действием электрического поля опять возвращаются к ГР диэлектрик–полупроводник. В результате в слое изолятора толщиной порядка  $\lambda$  (длина диффузии нейтральных частиц) у поверхности полупроводника возникает незатухающая циркуляция ионной и нейтральной компонент примеси, обуславливающая стационарный электронный ток через диэлектрик. Возникает вопрос — как локальный массоперенос сказывается на устойчивости однородного распределения частиц примеси вдоль ГР.

Данная работа посвящена исследованию стабильности раствора подвижных точечных дефектов в изоляторе у ГР диэлектрик–полупроводник по отношению к распаду, обеспечивающему мелкомасштабное распределение дефектов вдоль поверхности контакта. Анализ будет проведен на основе модели [4], развитой применительно к ионам  $\text{Na}^+$ , присутствующим в изолирующих слоях  $\text{SiO}_2$  на поверхности Si. В соответствии с этой моделью ионы могут перемещаться только в пределах диэлектрического промежутка; каждый ион и окружающая его матрица изолятора порождают локализованное электронное состояние. При заполнении этого состояния образуется нейтральный ассоциат (НА) ион + электрон. Ионный дрейф, диффузия НА, а также процессы их образования (нейтрализация ионов при переходе электронов из полупроводника на локализованные состояния) и распада

<sup>†</sup> E-mail: gvc@ms.ire.rssi.ru



**Рис. 1.** Кругооборот ионов и нейтральных ассоциатов у границы раздела изолятор–полупроводник [6,7]. *a*: 1 — полупроводник, 2 — изолятор, 3 — металл; *b*: кружок со знаком + — положительный ион, пустой кружок — нейтральный ассоциат ион + электрон,  $e^-$  — электрон,  $z$  — координата,  $z < 0$  — полупроводник,  $z > 0$  — изолятор,  $E_c$  — дно зоны проводимости контакта полупроводник–изолятор.

(ионизация НА при переходе электронов с локализованных состояний в полупроводник или в зону проводимости диэлектрика) определяют распределение подвижных частиц в изоляторе [5]. Для наших целей данная модель удобна тем, что описывает перенос дефектов, и, изменяя значения параметров, можно переходить к случаям систем частиц только одного сорта — ионам или НА, находящимся как в неравновесных, так и в равновесных условиях. Поскольку в нашей задаче важную роль играют упругие напряжения, связанные с растворением точечных дефектов в диэлектрике, а они сосредоточены вблизи ГР, будем учитывать и разрыв значений упругих констант на контакте диэлектрик–полупроводник, и проникновение деформаций в глубь полупроводника.

## 2. Основные уравнения

Будем полагать, что между НА возможно взаимодействие, а система подвижных частиц в изоляторе выведена из равновесия. Для простоты ограничимся

случаем изотропных, пространственно неограниченных диэлектрика и полупроводника. Объемную плотность свободной энергии иона и НА  $F$  с учетом упругих напряжений вследствие концентрационного расширения можно представить в виде

$$F = F_I + F_A + F_{\text{elast}}, \quad (1)$$

$$F_I = UN + TN \ln(N/N_I), \quad (2)$$

$$F_{\text{elast}} = G[\varepsilon_{mn} - \varepsilon_{mn}^0 - (1/3)(\varepsilon_{ll} - \varepsilon_{ll}^0)\delta_{mn}]^2 + (K/2)(\varepsilon_{ll} - \varepsilon_{ll}^0)^2. \quad (3)$$

Здесь  $F_I$ ,  $F_A$  — химическая часть свободной энергии ионов и НА соответственно,  $F_{\text{elast}}$  — энергия упругих напряжений;  $N$  — концентрация ионов;  $M$  — концентрация НА;  $U$  — потенциальная энергия иона во внешнем электрическом поле;  $T$  — температура в энергетических единицах; газ ионов полагается разреженным,  $N_I$  — нормировочная константа;  $G$  и  $K$  — модули сдвига и сжатия, причем в изоляторе ( $z > 0$ )  $G = G_s$  и  $K = K_{\text{ins}}$ , а в полупроводнике ( $z < 0$ )  $G = G_s$  и  $K = K_s$ ;  $\varepsilon_{mn}$  — тензор деформации,  $\varepsilon_{mn} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_m}{\partial x_n} + \frac{\partial u_n}{\partial x_m})$ ,  $m, n = 1, 2, 3$ , координата  $x_3 = z$ ;  $\mathbf{u}$  — вектор смещения; выражение (3) для  $F_{\text{elast}}$  записано в форме Ройтбурда [6], тензор  $\varepsilon_{mn}^0$  соответствует ненапряженному состоянию (т.е. когда тензор напряжений  $\sigma_{mn} \equiv 0$ ); в случае концентрационного расширения  $\varepsilon_{mn}^0 = (1/3)(N\Omega_I + M\Omega_A)\delta_{mn}$ ,  $\delta_{mn}$  — символ Кронекера,  $\Omega_I$  и  $\Omega_A$  — объемы расширения, приходящиеся на один ион и один НА соответственно.

Плотности потоков ионов  $\mathbf{J}_I$  и НА  $\mathbf{J}_A$  выражаются через градиенты их химических потенциалов  $\eta_I$  и  $\eta_A$ , подвижность ионов  $\mu_I$  и коэффициент диффузии НА  $D_A$ :  $\mathbf{J}_I = -(\mu_I N/q)\nabla\eta_I$ ,  $\mathbf{J}_A = -(D_A M/T)\nabla\eta_A$ . В свою очередь  $\eta_I$  и  $\eta_A$ , а также тензор напряжений  $\sigma_{mn}$  — производные плотности свободной энергии:  $\eta_I = (\partial F/\partial N)_{\varepsilon_{ik}, M}$ ,  $\eta_A = (\partial F/\partial M)_{\varepsilon_{ik}, N}$ ,  $\sigma_{mn} = (\partial F/\partial \varepsilon_{mn})_{N, M}$ . Имеем

$$\mathbf{J}_I = -\frac{\mu_I}{q} (N\nabla U + T\nabla N - N\Omega_I\nabla\sigma),$$

$$\mathbf{J}_A = -\frac{D_A}{T} [\nabla(M\eta_{A0} - F_A) - M\Omega_A\nabla\sigma], \quad (4)$$

где  $\sigma$  — значение тензора упругих напряжений, усредненное по направлениям,  $\sigma = (1/3)\sigma_{mn} = K[\varepsilon_{ll} - (\Omega_A M + \Omega_I N)]$ .

Распределения частиц (ионов и НА) по изолятору, а также упругих напряжений в окрестности ГР диэлектрик–полупроводник в момент времени  $t$  описываются уравнениями:

$$\frac{d\sigma_{mn}}{dx_n} = 0, \quad (5)$$

$$\nabla\mathbf{J}_I - \frac{M}{\tau} - \frac{M}{\tau_i} + \frac{N}{\tau_n} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \nabla\mathbf{J}_A - \frac{N}{\tau_n} + \frac{M}{\tau_i} + \frac{M}{\tau} = 0, \quad (7)$$

где  $\tau$  — характерное время распада НА, связанного с переходом электрона в зону проводимости изолятора;  $\tau_i(z)$  — характерное время ионизации находящегося на расстоянии  $z$  от границы с полупроводником ассоциа-

та, обусловленной уходом электрона в полупроводник;  $\tau_n(z)$  — характерное время нейтрализации находящегося на расстоянии  $z$  от ГР иона, связанной с приходом электрона из полупроводника [4,7]. Время диффузии НА многократно больше времен перестройки упругих напряжений и ионного дрейфа. Поэтому распределения ионов и упругих напряжений квазистационарны и соответствуют мгновенному распределению НА.

Решение уравнений (5), описывающих распределение упругих деформаций, обусловленных эффектом концентрационного расширения, при  $z > 0$  имеет вид

$$\varepsilon_{ll} = v[\varepsilon_{ll}^0 - \chi \hat{L}(\varepsilon_{ll}^0)], \quad \varepsilon_{ll}^0 = \Omega_I N + \Omega_A M, \quad (8)$$

$$\hat{L}(\varepsilon_{ll}^0) \equiv \int d^2 \mathbf{r}' \int_0^\infty dz' \varepsilon_{ll}^0(\mathbf{r}', z') v(z, z', |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|),$$

$$v(z, z', |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{1}{2\pi} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 - 2(z + z')^2}{[(z + z')^2 + (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2]^{5/2}},$$

$$v = \left( \frac{3K_{ins}}{3K_{ins} + 4G_{ins}} \right),$$

$$\chi = \frac{6G_{ins}(G_{ins} - G_s)}{G_{ins}(3K_{ins} + G_{ins}) + G_s(3K_{ins} + 7G_{ins})},$$

$\mathbf{r}$  — радиус-вектор в плоскости ГР изолятор–полупроводник. Таким образом, эффект концентрационного расширения приводит, вообще говоря, к нелокальной зависимости потоков ионов и НА от их концентраций. Нелокальность обусловлена разрывом значений упругих модулей на ГР и ее описывает оператор  $\hat{L}$ . Причем, если функция  $\varepsilon_{ll}^0$  не зависит от координат в плоскости ГР, то  $\hat{L}[\varepsilon_{ll}^0(z)] \equiv 0$ . Из соотношений (4) и (8) явствует, что эффект концентрационного расширения существует лишь при больших концентрациях частиц:  $KN\Omega_I^2 \approx T$ ,  $KM\Omega_A^2 \approx T$  или выше.

### 3. Однородное вдоль поверхности изолятора состояние системы ионы–нейтральные ассоциаты

Полагая, что объемные концентрации ионов малы ( $N\Omega_I \ll M\Omega_A$ ), будем далее учитывать концентрационное расширение только от НА. Однородные в плоскости ГР изолятор–полупроводник стационарные распределения ионов и НА описываются уравнениями

$$\frac{D_A}{T} \frac{d^2 [M\eta_{A0} - F_A + \frac{1}{2}(1-v)K\Omega_A^2 M^2]}{dz^2} + \frac{N}{\tau_n} - \frac{M}{\tau_i} - \frac{M}{\tau} = 0, \quad (9)$$

$$J_{Iz} = -\frac{\mu_I}{q} \left[ N \frac{dU}{dz} + T \frac{dN}{dz} + NK\Omega_I \Omega_A (1-v) \frac{dM}{dz} \right] = \frac{D_A}{T} \frac{d [M\eta_{A0} - F_A + \frac{1}{2}(1-v)K\Omega_A^2 M^2]}{dz} \quad (10)$$

с граничными условиями  $M|_{z \rightarrow \infty} = 0$ ,  $N|_{z \rightarrow \infty} = 0$  и  $\frac{dM}{dz}|_{z=0} = 0$ . Вероятности ионизации  $\tau_i^{-1}(z)$  и нейтра-

лизации  $\tau_n^{-1}(z)$  резко спадают с ростом  $z$  вследствие увеличения длины туннелирования и высоты туннельного барьера [7]. Будем полагать, что  $(\lambda/\tau_n)(d\tau_n/dz) \gg 1$ ,  $(T|dU/dz|^{-1})(1/\tau_n)(d\tau_n/dz) \gg 1$ , т.е. функции  $\tau_i(z)$  и  $\tau_n(z)$  изменяются с  $z$  гораздо быстрее, чем  $M(z)$  и  $N(z)$ . Здесь  $\lambda^2 = D_A \tau$ . Тогда из уравнения (9) следует:

$$\left. \begin{aligned} & \int_M^{M_0} \frac{dM_1}{M_1} \frac{d}{dM_1} \left\{ \left[ \left( \int_0^{M_1} M_2^2 \frac{d\eta_{A0}}{dM_2} dM_2 \right) + \frac{1}{3}(1-v)K\Omega_A^2 M_1^3 \right]^{1/2} \right\} = \left( \frac{T}{2} \right)^{1/2} \frac{z}{\lambda}, \quad (11) \\ & N_0 \cong \frac{\tau_{n0} M_s}{\tau \delta_0} + M_0 \frac{\tau_{n0}}{\tau_{i0}} \end{aligned} \right\}$$

где  $N_0 = N|_{z=0}$ ,  $M_0 = M|_{z=0}$ ,  $M_s = \int_0^\infty M dz$ ,  $\delta_0 = \tau_{n0} \int_0^\infty \tau_n^{-1} dz$  — характерное расстояние, определяющее зависимости  $\tau_n$  и  $\tau_i$  от  $z$ ,  $\tau_{n0} = \tau_n|_{z=0}$ ,  $\tau_{i0} = \tau_i|_{z=0}$ .

Второе равенство (11) служит граничным условием при определении функции  $N(z)$  из уравнения (10). Первое равенство (11) отличается от точного решения уравнения (19) на малые члены порядка  $(\delta_0/\lambda) \ll 1$ , но именно они обеспечивают исчезновение потока НА при  $z = 0$ . Концентрация НА, как отдельных частиц в изолирующем слое, ограничена пределом растворимости  $M_0 < M_*$ . Это неравенство эквивалентно условию  $(d\eta_A/dM) > 0$  [8], т.е.  $(d\eta_{A0}/dM) + (1-v)K\Omega_A^2 > 0$ . Характерный масштаб, на котором спадает концентрация НА, определяется выражением

$$\bar{\lambda} \equiv -\left( \frac{1}{M} \frac{dM}{dz} \right)^{-1} = \lambda \left( \frac{2}{T} \right)^{1/2} \frac{d}{dM} \times \left\{ \left[ \left( \int_0^M M_1^2 \frac{d\eta_{A0}}{dM_1} dM_1 \right) + \frac{1}{3}(1-v)K\Omega_A^2 M^3 \right]^{1/2} \right\}. \quad (12)$$

По порядку величины  $\bar{\lambda} \approx \lambda(M_* - M)/M_*$ . Фактически соотношения (11)–(12) справедливы при  $\delta_0 \ll \bar{\lambda}$  и являются обобщением результатов, полученных в [7] в пределах малых концентраций НА:  $M \ll M_*$ .

### 4. Условия неустойчивости однородного вдоль поверхности изолятора распределения частиц

Исследуем устойчивость системы частиц по отношению к латеральному перераспределению. Имеем:  $M = \bar{M} + \delta M$ ,  $N = \bar{N} + \delta N$ . Функции  $\bar{M}(z)$  и  $\bar{N}(z)$  —

решения системы одномерных уравнений (9) и (10),  $\delta M(\mathbf{r}, z, t)$  и  $\delta N(\mathbf{r}, z, t)$  — малые добавки. Вначале рассмотрим случай, когда концентрация ионов достаточно велика  $[\frac{4\pi q^2 N}{\kappa_i T}]^{1/2} \gg k$ , ( $\kappa_i$  — диэлектрическая проницаемость изолятора,  $k$  — характерный волновой вектор распределения частиц в плоскости  $z = \text{const}$ ) и они полностью экранируют модуляционную составляющую упругих сил концентрационного расширения, действующих на заряженные частицы.<sup>1</sup> Тогда можно считать  $\delta N = 0$ . После линеаризации добавка к току НА принимает вид

$$\delta \mathbf{J}_A = -D_A \left\{ \nabla [f(z)\delta M] + \frac{Kv\chi\Omega_A^2 \tilde{M}(z)}{T} \nabla \hat{L}(\delta M) \right\}.$$

Здесь

$$f(z) \equiv \frac{1}{T} \left[ M \frac{d\eta_{A0}}{dM} + (1-\nu)K\Omega_A^2 M \right]_{M=\tilde{M}(z)},$$

$f > 0$ ,  $f(z)|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 1$ . Временные и координатные зависимости концентрации НА описываются уравнением (10). Соответственно, переходя к преобразованию Фурье по двумерному вектору  $\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{k}$  и к преобразованию Лапласа по времени  $t \Rightarrow s$ ,  $\delta M \Rightarrow \tilde{\delta M}$  (знак  $\sim$  сверху означает образ от преобразований Фурье и Лапласа), для ассоциатов получаем

$$\frac{d^2}{dz^2} (f\tilde{\delta M}) - p^2 f\tilde{\delta M} + \alpha k^2 Y \frac{e^{-kz}}{M_0} \frac{d\tilde{M}}{dz} - \frac{\tau \tilde{\delta M}}{\tau_i \lambda^2} + \frac{\tau \tilde{\delta M}}{\lambda^2} = 0, \quad (13)$$

где  $\tilde{\delta M}(z, \mathbf{k})$  — образ Фурье распределения  $\delta M$  при  $t = 0$ . Граничные условия:  $\tilde{\delta M}|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0$  и  $\frac{d(f\tilde{\delta M})}{dz}|_{z=0} = -\alpha k^2 Y$ , где  $p^2 = k^2 + \frac{1+s\tau}{f\lambda^2}$ ,  $\alpha = \frac{K_{\text{ins}} \nu \chi \Omega_A^2 M_0}{T}$ ,  $Y = \int_0^\infty e^{-kz'} \tilde{\delta M} dz'$ . Полагая  $\delta_0 \ll \tilde{\lambda}$ ,  $k\delta_0 \ll 1$ , решение уравнения (13) можно записать в виде:

$$f(z)\tilde{\delta M}(z) = -\frac{\tau}{\lambda^2} \int_0^\infty \Gamma_I(z, z') \tilde{\delta M}(z') dz' + \frac{\alpha k^2 \tau}{(1+s\tau + \alpha\Theta_1)} \left[ \int_0^\infty \frac{\tilde{M}(z_1)}{M_0} \frac{d}{dz_1} \left[ \Gamma_I(z, z_1) e^{-kz_1} \right] dz_1 \right] \times \left[ \int_0^\infty \gamma_I(z') \tilde{\delta M}(z') dz' \right], \quad (14)$$

<sup>1</sup> Отметим, что в случае чисто ионной системы (малая степень нейтрализации) кулоновское отталкивание зарядов и возникающее вследствие этого экранирование фактически запрещают расслоение раствора частиц вдоль ГР.

$$\Gamma_I(z, z') = \left[ g_A(z, z') + \frac{g_A(z, 0)g_A(0, z')}{\frac{f_0 \tau_{i0} \lambda^2}{\tau \delta_0} - g_A(0, 0)} \right],$$

$$\Theta_1 = k^2 \lambda^2 \int_0^\infty dz' \frac{\tilde{M}(z')}{M_0} \frac{d}{dz'} [e^{-kz'} \gamma_I(z')],$$

$$\gamma_I(z) = \left\{ e^{-kz} + g_A(0, z) \frac{[1 + \frac{\tau_{i0} \lambda^2 k f_0}{\tau \delta_0}]}{[\frac{\tau_{i0} \lambda^2 f_0}{\tau \delta_0} - g_A(0, 0)]} \right\},$$

$f_0 = f(0)$ ;  $g_A(z, z')$  — функция Грина:

$$\frac{d^2 g_A}{dz^2} - p^2 g_A = \delta(z - z'), \quad \left. \frac{d g_A}{dz} \right|_{z=0} = 0,$$

$g_A \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow \infty$ .

Первое слагаемое в выражении (14) описывает рассасывание латеральных неоднородностей распределения НА без учета влияния ГР на деформацию изолятора, а второе соответствует вкладу взаимодействия ассоциатов через поле упругих напряжений, порожденное концентрационным расширением вблизи ГР.

Рассмотрим эволюцию распределения НА, произошедшую за большой период времени. В соответствии с методом перевала [9] асимптотика обратного преобразования Лапласа при  $t \rightarrow \infty$  описывается как сумма вкладов от критических точек подынтегральной функции, т.е. правой части равенства (14) как функции  $s$ . В нашем случае на комплексной плоскости  $s$  имеется два типа критических точек: точка ветвления зависимости  $p(s)$ , причем выбор ветви функции  $p(s)$  определяется условием  $\text{Re } p > 0$ , и полюсы второго слагаемого в выражении (14), т.е. значения  $s$ , удовлетворяющие уравнению

$$(1 + s\tau + \alpha\Theta_1) = 0. \quad (15)$$

При  $k^2 \lambda^2 f(z) \gg 1$  точке ветвления  $p(s)$  будет соответствовать слагаемое с „диффузионной“ асимптотикой, пропорциональное  $\exp(-k^2 f(z) Dt)$ . В обратном случае  $k^2 \lambda^2 f(z) \ll 1$  асимптотика будет „рекомбинационная“,  $\propto \exp(-t/\tau)$ . Уравнение (15) заведомо имеет решение  $s = -1/\tau$ . Действительно, при этом  $p = k$ ,  $g_A(z, 0) = -(1/k)e^{-kz}$ ,  $\gamma_I(z) \equiv 0$ ,  $\Theta_1 = 0$ . Однако это решение не имеет физического смысла, так как данный корень — лишний и обусловлен операциями деления и умножения на  $(1 + s\tau)$  при вычислениях. При  $\alpha > -\alpha_1$  уравнение (15) других решений не имеет. В условиях  $\alpha < -\alpha_1$  появляется еще одно решение уравнения (15):  $s = \bar{s}(k)$ . Ему в асимптотике латерального распределения НА соответствует слагаемое, пропорциональное  $\exp(\bar{s}t)$ . Причем, если  $-\alpha_2 < \alpha < -\alpha_1$ , то  $0 > \bar{s} > -(1/\tau)$ . Если  $\alpha < -\alpha_2$ , то  $\bar{s}(k) > 0$  в интервале  $k_1 < k < k_2$ . Здесь  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — некоторые положительные числа, значения волновых векторов  $k_1$  и  $k_2$  зависят от величины параметра  $\alpha$ . Таким образом, при  $\alpha > -\alpha_2$  однородное латеральное распределение НА устойчиво по отношению ко всем флуктуациям, а при  $\alpha < -\alpha_2$  неустойчиво по отношению к флуктуациям с волновыми векторами в интервале  $k_1 < k < k_2$ .

Оценить качественный вид функции  $\Theta_1(s, k)$ , значения параметров  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , а также волновые вектора  $k_1$  и  $k_2$  можно, предположив  $|dp/dz| \ll |p|^2$  и  $|d\tilde{\lambda}/dz| \ll 1$ .<sup>2</sup> Тогда

$$\frac{\tilde{M}(z)}{M_0} \cong \exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{\tilde{\lambda}(z')}\right),$$

$$g_A(0, z) \cong -\frac{1}{\sqrt{p_0 p(z)}} \exp\left[-\int_0^z p(z') dz'\right]$$

и при  $[\tilde{\lambda}_0(p_0 + k) + 1] \frac{k\tau_0\lambda^2 f_0}{\tau\delta_0} \ll 1$ <sup>3</sup> получается  $\alpha_1 = f_0(3 + 2\sqrt{2})$ ; если  $(\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2) \ll 1$ , то  $\alpha_2 = f_0 \times [16 + (12\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2)]$ , если  $(\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2) \gg 1$ ,<sup>4</sup> то  $\alpha_2 = 6\sqrt{3}f_0(\tilde{\lambda}_0/\lambda)$ . Здесь  $p(0) = p_0$ ,  $\tilde{\lambda}_0 = \tilde{\lambda}(0)$ . Значение вектора  $k_m$ , отвечающего максимально быстро нарастающей неустойчивости  $[\tilde{s}(k)$  максимально при  $k = k_m$ ], составляет:  $k_m \approx 1/2\tilde{\lambda}_0$  при  $(\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2) \ll 1$  и  $k_m \approx (1/18\tilde{\lambda}_0)(-\alpha/f_0)$  при  $(\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2) \gg 1$ . Естественно, что полученные результаты имеют физический смысл только, если  $ka \ll 1$ , где  $a$  — радиус НА.

Рассмотрим случай малого количества ионов, когда экранированием флуктуаций можно пренебречь —  $(4\pi q^2 N/k_i T)^{1/2} \ll [k, (1/T)(dU/dz), (1/\tilde{\lambda})]$ . Малая добавка к стационарному потоку ионов принимает вид:  $\delta\mathbf{J}_I = -(\mu_I/q)(\delta N \nabla U + T \nabla \delta N - \Omega_I \tilde{N} \nabla \delta \sigma)$ , где  $\delta \sigma = -K\Omega_A[(1-\nu)\delta M + \nu\chi\tilde{L}(\delta M)]$ . При записи выражения для  $\delta\mathbf{J}_I$  мы считали поле в изоляторе большим по сравнению с силами упругих напряжений  $dU/dz \gg \Omega_I |d\sigma/dz|$ . Временные и координатные зависимости концентраций ионов и НА описываются уравнениями (9) и (10). Соответственно, линеаризуя их, переходя к преобразованию Фурье по двумерному вектору  $\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{k}$  и к преобразованию Лапласа по времени  $t \Rightarrow s$ ,  $\delta N \Rightarrow \delta\tilde{N}$  (знак  $\sim$  сверху означает образ от

преобразований Фурье и Лапласа), получаем

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} (f\delta\tilde{M}) - p^2 f\delta\tilde{M} + \alpha k^2 Y \frac{e^{-kz}}{M_0} \frac{d\tilde{M}}{dz} \\ + \frac{\tau}{\lambda^2} \left( \frac{\delta\tilde{N}}{\tau_n} - \frac{\delta\tilde{M}}{\tau_i} \right) + \frac{\tau\delta\tilde{M}}{\lambda^2} = 0, \\ \frac{d}{dz} \left[ e^{-U/T} \frac{d}{dz} \left( e^{U/T} \delta\tilde{N} \right) \right] - k^2 \delta\tilde{N} \\ - \frac{\Omega_I}{T} \left[ \frac{d}{dz} \left( \tilde{N} \frac{d\delta\tilde{\sigma}}{dz} \right) - k^2 \tilde{N} \delta\tilde{\sigma} \right] \\ + \frac{q}{\mu_I T \tau} \left[ \delta\tilde{M} + \tau \left( \frac{\tau\tilde{M}}{\tau_i} - \frac{\delta\tilde{N}}{\tau_n} \right) \right] = 0 \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Решение первого уравнения (16) аналогично выражению (14), но имеет существенно более громоздкий вид. Однородное латеральное распределение НА становится неустойчивым если имеются положительные корни  $s = \bar{s}(k) > 0$  уравнения

$$(1 + s\tau + \alpha\Theta_{II}) = 0. \quad (17)$$

Зависимости  $\Theta_{II}(s, k)$  выражаются через функции Грина первого и второго уравнений (16). Неустойчивость развивается в двух случаях: при  $\alpha < -\alpha_3$  или одновременно при  $\alpha > \alpha_4$  и при  $\Omega_I/\Omega_A > \alpha_5$ . Здесь  $\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$  — некоторые положительные числа. Их оценка возможна при  $|dp/dz| \ll |p|^2$ ,  $|d\tilde{\lambda}/dz| \ll 1$  и в условиях  $(\tau_{i0}\lambda^2/\tau\delta_0\tilde{\lambda}_0) \ll 1$ ,  $(qD_A/\mu_I T) \ll 1$ .<sup>5</sup> Получается:  $\alpha_3 = 16 + 8|\chi|(\Omega_I/\Omega_A)$  при  $(\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2) \ll 1$ ,  $\alpha_3 = \frac{\tilde{\lambda}_0}{\lambda} \max(6\sqrt{3}f_0, 2|\chi|(\Omega_I/\Omega_A)\sqrt{f_0})$  при  $(\tilde{\lambda}_0^2/f_0\lambda^2) \gg 1$ ;  $\alpha_4 = 2[(\Omega_I/\Omega_A) - (2/|\chi|)]^{-1}$ ,  $\alpha_5 = 2/|\chi|$ .

## 5. Обсуждение результатов

Проанализируем полученные результаты. Полная энергия упругих напряжений при отсутствии внешних деформационных воздействий на границах образца записывается в форме интеграла по объему изолятора  $\Phi_{\text{elast}} = -(1/2) \int dV \sigma \varepsilon_{II}^0$ . (Справедливо и аналогичное соотношение, учитывающее анизотропию [2]). Принимая во внимание выражения (8) и пренебрегая концентрационным расширением, связанным с ионами, получаем

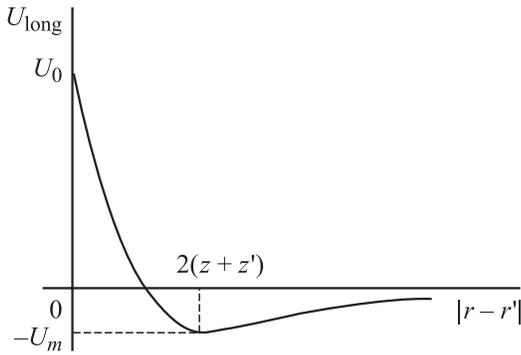
$$\Phi_{\text{elast}} = (1/2)K_{\text{ins}}\Omega_A^2(1-\nu) \int d\mathbf{R}M^2 + (1/2)K_{\text{ins}}\Omega_A^2\nu\chi \times \iint d\mathbf{R}d\mathbf{R}'M(\mathbf{R})M(\mathbf{R}')v(z, z', |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).$$

<sup>5</sup> По поводу первых трех неравенств см. сноски 2 и 3. Физический смысл последнего — ассоциаты гораздо менее подвижные частицы, чем ионы. Поэтому распределение ионов — бальмановское во внешнем, направленном по нормали к ГР, электрическом поле и в изменяющемся вдоль ГР поле упругих напряжений. В эксперименте [5] отношение  $(qD_A/\mu_I T)$  составляло  $\approx 10^{-8}$ .

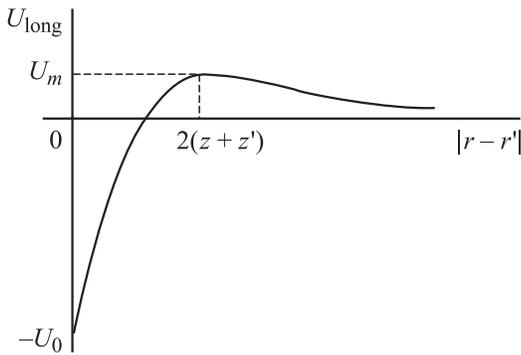
<sup>2</sup> Строго говоря, условие  $|dp/dz| \ll |p|^2$  выполняется вдали от предела растворимости ( $M \ll M_*$ ), а также в отсутствие химического взаимодействия, в том числе и для актуальных концентраций НА при  $(1-\nu)K\Omega_A^2 M \gg T$ ; условие  $|d\tilde{\lambda}/dz| \ll 1$  выполняется вдали от предела растворимости, при  $(1-\nu)K\Omega_A^2 M \gg T$  в отсутствие химического притяжения  $|d\tilde{\lambda}/dz| = 1/2$ .

<sup>3</sup> Образование ассоциатов (нейтрализация ионов) происходит у ГР и определяется балансом процессов туннельного захвата электронов из полупроводника, ионизации нейтральных частиц путем туннелирования электронов обратно в полупроводник и диффузии НА в глубь изолятора. Поэтому неравенства  $\tau \gg \tau_{i0}, \tau_{n0}$  — это фактически необходимые условия проникновения ассоциатов в объем изолятора. Переход к пределу  $\tau_{i0}, \tau_{n0} \rightarrow 0$  приводит к равенству  $N_0/M_0 = \tau_{n0}/\tau_{i0}$  и означает, что на ГР ионы и ассоциаты находятся в равновесии с полупроводником, т.е. заполнение локализованных электронных состояний, порожденных ионами и окружающей областью изолятора, определяется уровнем Ферми электронов в полупроводнике. В эксперименте [5] выполнялось соотношение  $\tau/\tau_{i0} > 10^{18}$ .

<sup>4</sup> Это неравенство возможно лишь при достаточно сильном, описываемом функцией  $\eta_{A0}(M)$ , отталкивании НА.



**Рис. 2.** График потенциальной энергии дальнего взаимодействия ассоциатов через поле упругих напряжений в случае  $G_{\text{ins}} < G_s$ .  $U_0 = \frac{K_{\text{ins}} \Omega_A^2 v |\chi|}{2\pi(z+z')^3}$ ,  $\frac{U_0}{U_m} = 25\sqrt{2}$ .



**Рис. 3.** График потенциальной энергии дальнего взаимодействия ассоциатов через поле упругих напряжений в случае  $G_{\text{ins}} > G_s$ .  $U_0 = \frac{K_{\text{ins}} \Omega_A^2 v |\chi|}{2\pi(z+z')^3}$ ,  $\frac{U_0}{U_m} = 25\sqrt{2}$ .

Таким образом, в изоляторе имеются два вида парного взаимодействия НА через поле упругих напряжений: короткодействующее отталкивание с энергией  $U_{\text{short}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = (1/2)K_{\text{ins}} \Omega_A^2 (1 - \nu) \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$  и дальнедействующее с энергией  $U_{\text{long}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = (1/2)K_{\text{ins}} \Omega_A^2 \nu \chi v(z, z', |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ . Первое отвечает взаимодействию в неограниченной однородной упругой среде. Принципиальным моментом для второго является наличие ГР, точнее говоря, поверхности разрыва значений модулей сдвига. Именно данное обстоятельство обеспечивает дальнедействие взаимодействия и не центральный характер связанных с ним сил. В этом смысле рассматриваемый эффект сродни дополнительному электростатическому взаимодействию двух зарядов у металлической поверхности из-за возникающих сил изображения. График  $U_{\text{long}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  при  $z, z' = \text{const}$  для случая  $G_{\text{ins}} < G_s$  ( $\chi < 0$ ,  $\alpha < 0$ ) представлен на рис. 2. Вдоль ГР дальнедействие приводит к отталкиванию близко расположенных ассоциатов и к взаимному притяжению частиц, находящихся на больших расстояниях друг от друга. Если взаимное притяжение на среднем расстоянии между НА (т.е.  $M_0^{-1/3}$ ) достаточно сильное по сравнению с диффузионным

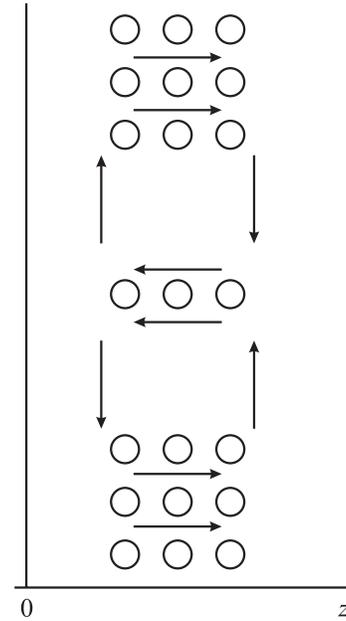
рассасыванием частиц, или, другими словами, разность потенциалов притяжения существенно выше температуры, выраженной в энергетических единицах (фактически  $|\alpha| = K_{\text{ins}} \nu \chi |\chi| \Omega_A^2 M_0 / T$  — это отношение указанных энергий), то однородное распределение НА неустойчиво как для сильного ионного экранирования, так и в его отсутствие. Минимум энергии  $U_{\text{long}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  достигается при расстоянии между НА  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 2(z + z')$ . Типичные значения удаления от ГР  $z \approx \tilde{\lambda}_0$ , соответственно и характерные периоды расслоения порядка  $\tilde{\lambda}_0$ . На рис. 3 приведен график  $U_{\text{long}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  при  $z, z' = \text{const}$  для случая  $G_{\text{ins}} > G_s$  ( $\chi > 0$ ,  $\alpha > 0$ ). Области притяжения ассоциатов (до максимума энергии) соответствуют расстоянию между НА  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < 2(z + z')$ , а минимум энергии  $U_{\text{long}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  достигается при  $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = 0$ . Следовательно, оптимальные с точки зрения расслоения вдоль поверхности изолятора флуктуации распределения частиц имеют периоды, а соответственно и удаления от ГР, много меньше  $\tilde{\lambda}_0$ , и можно считать, что их концентрации равны значениям на поверхности. Но на ГР ионы и НА находятся в равновесии с электронами полупроводника: так как  $\tau_{n0}, \tau_{i0} \ll \tau$  (см. сноску 3), то  $N_0/M_0 = \tau_{n0}/\tau_{i0}$ . Поэтому сильное ионное экранирование препятствует расслоению частиц, поскольку  $\delta N_0 = 0$ . В отсутствие экранирования однородное вдоль поверхности изолятора распределение частиц будет неустойчиво при выполнении двух условий. Во-первых, требуется достаточно сильное взаимное притяжение ассоциатов (т.е. достаточно большое значение  $\alpha$ ). Во-вторых, из-за равновесия между ионами и ассоциатами их распределения должны быть синхронизованы. Иначе говоря, ионы также должны притягиваться к сгусткам нейтральных частиц под действием поля упругих напряжений. А для этого необходимо, чтобы объем расширения  $\Omega_i$ , приходящийся на один ион, был достаточно велик.

В условиях развития концентрационно-упругих расслоений при  $G_{\text{ins}} < G_s$  в диэлектрике у ГР возникают сгустки и разрежения плотности НА, а в стационарном состоянии — сопутствующие этим неоднородностям незатухающие кольцевые движения частиц. Действительно, поток ассоциатов, связанный с флуктуацией их концентрации  $\delta M$ , описывается выражением

$$\delta \mathbf{J}_A = -D_A \left\{ \nabla [f(z) \delta M] + 2\bar{M}(z) \times \int d^2 \mathbf{r}' \int_0^\infty dz' \delta M(\mathbf{r}', z') \nabla [(1/T) U_{\text{long}}(z, z', |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)] \right\}.$$

Короткодействующая часть взаимодействия НА через поле упругих напряжений концентрационного расширения лишь усиливает диффузионную составляющую потока. Дальнедействующие компоненты от всех частиц складываются в силу упругой деформации, которая обуславливает дрейф ассоциатов. Вдоль плоскости  $z = \text{const}$  дальнедействующее взаимодействие заставляет НА перемещаться так, чтобы сформировать чередующиеся области повышенной ( $\delta M > 0$ ) и пони-

женной ( $\delta M < 0$ ) концентрации нейтральных частиц. Осцилляции концентрации НА вдоль ГР не периодические, расстояние между центрами соседних сгустков должно быть порядка  $l$ , где величина  $l = l(z)$  пропорциональна  $\tilde{\lambda}_0$  и связана с усреднением значения и положения минимума потенциальной энергии парного взаимодействия ассоциатов (см. рис. 2) по их координатам. Модуляция концентрации частиц затухает в глубь изолятора на масштабах  $\sim \tilde{\lambda}_0$ , причем в отсутствие ионного экранирования она начинается непосредственно у ГР, а при сильном экранировании — с отступлением от контакта полупроводник–диэлектрик на расстояние порядка  $\tilde{\lambda}_0$ . Упругие напряжения сдвига, порожденные неоднородностью распределения НА вдоль ГР, обеспечивают массоперенос и в стационарном состоянии. На частицу, имеющую координаты  $(\mathbf{r}, z)$ , через поле упругого концентрационного расширения действуют силы, источниками которых служат другие НА с координатами  $(\mathbf{r}', z')$ . Поскольку энергия взаимодействия падает обратно пропорционально кубу расстояния между ассоциатами, для оценки суммарной силы ограничимся источниками, расположенными внутри цилиндра диаметра  $l$  с осью, проходящей через частицу. Пусть последняя находится в области сгустка при  $z \approx l$ . Тогда для источников в сгустке  $\delta M(\mathbf{r}', z') > 0$ ,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll (z + z')$  и  $\partial U_{\text{long}}/\partial z < 0$ ,  $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}')\nabla_{\mathbf{r}'} U_{\text{long}} < 0$ ; для источников в разрежении  $\delta M(\mathbf{r}', z') < 0$ ,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \propto (z + z')$  и  $\partial U_{\text{long}}/\partial z > 0$ ,  $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}')\nabla_{\mathbf{r}'} U_{\text{long}} < 0$ . Суммарная сила упругой деформации, действующая на частицу, равна  $\int_0^{\infty} dz' \int d\mathbf{r}' \delta M(\mathbf{r}', z') \nabla U_{\text{long}}(z, z', |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ . Следовательно, нормальные к поверхности изолятора составляющие сил от источников в сгустке и разрежении по модулю складываются и направлены от ГР; параллельные поверхности составляющие сил вычитаются, причем их равнодействующая в центре сгустка равна нулю, а при отступлении от центра направлена от сгустка к разрежению. Если  $z \ll l$  и частица находится в сгустке, то для источников в сгустке  $\delta M(\mathbf{r}', z') > 0$ , расстояния  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  как меньше, так и больше  $(z + z')$ , производные  $\partial U_{\text{long}}/\partial z$  и  $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}')\nabla_{\mathbf{r}'} U_{\text{long}}$  знакопеременны; для источников в разрежении  $\delta M(\mathbf{r}', z') < 0$ ,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > (z + z')$  и  $\partial U_{\text{long}}/\partial z > 0$ ,  $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}')\nabla_{\mathbf{r}'} U_{\text{long}} > 0$ . Поэтому вклад источников из сгустка не существен, нормальная к поверхности диэлектрика составляющая равнодействующей упругой силы направлена в глубь изолятора, параллельная ГР компонента этой силы в центре сгустка равна нулю, а при отступлении от центра направлена от разрежения к сгустку. В области разрежения при  $z \approx l$  для источников в сгустке  $\delta M(\mathbf{r}', z') > 0$ ,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \propto (z + \bar{z})$  и  $\partial U_{\text{long}}/\partial z > 0$ ,  $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}')\nabla_{\mathbf{r}'} U_{\text{long}} < 0$ ; для источников в разрежении  $\delta M(\mathbf{r}', z') < 0$ ,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll (z + \bar{z})$  и  $\partial U_{\text{long}}/\partial z < 0$ ,  $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}')\nabla_{\mathbf{r}'} U_{\text{long}} < 0$ . Поэтому перпендикулярная к ГР составляющая равнодействующей силы направлена к поверхности полупроводника, параллельная ГР составляющая направлена к центру разрежения и непосредственно в центре обращается в нуль. Аналогично проекции силы упругой деформации, действующей на частицу, находящуюся в области разрежения



**Рис. 4.** Сгустки и разрежения нейтральных ассоциатов, а также стационарные кольцевые потоки частиц у границы раздела изолятор–полупроводник в случае  $G_{\text{ins}} < G_s$ . Обозначения соответствуют рис. 1, *b*. Стрелками схематически указаны направления дрейфа ассоциатов под действием упругих сил концентрационного расширения.

при  $z \ll l$ , направлены: по оси  $z$  — к ГР, параллельно поверхности раздела — от разрежения к сгустку. Такое распределение поля сил упругой деформации концентрационного расширения приводит к кольцевым потокам ассоциатов (см. рис. 4) в дополнение к не связанному с упругими деформациями кругообороту частиц (см. рис. 1, *b*). НА дрейфуют от контакта полупроводник–изолятор вдоль оси сгустка, постепенно отклоняются и разворачиваются к областям разрежения. Вдоль области разрежения ассоциаты двигаются обратно к ГР, поворачивают и далее перемещаются параллельно поверхности диэлектрика к сгустку.

В случае  $G_{\text{ins}} > G_s$  концентрационно-упругая неустойчивость приводит к образованию плоских кластеров (пятен) частиц на поверхности изолятора. Это обусловлено парным притяжением ассоциатов на малых расстояниях (см. рис. 3). Естественно, группирование частиц развивается только при высокой степени нейтрализации, когда концентрация ионов мала и они не экранируют возникающие неоднородности. В стационарных условиях скопления НА на ГР сопутствуют назатухающие кольцевые потоки ассоциатов и ионов. Под действием силы упругой деформации концентрационного расширения частицы на поверхности дрейфуют от кластеров в область разрежения; оттуда — в глубь диэлектрика, разворачиваясь по мере удаления от ГР к нормали над центром кластера; и наконец, замыкает кольцевой поток дрейф ассоциатов и ионов к скоплению частиц по нормали к ГР.

Эффект концентрационно-упругих расслоений раствора НА вдоль ГР не обязательно является предвестником спиноподобного распада. В частности, последний можно исключить, положив, что между ассоциатами нет химического притяжения, ответственного за образование фазы, т.е. считать  $\eta_{A0} = T[\ln(M/M_A) + 1]$ ,  $f(z) = 1 + [(1 - \nu)K\Omega_A^2\bar{M}]/T$ . Такая конкретизация лишь изменит значения констант  $\alpha_2 - \alpha_5$ , определяющих значения параметров, при которых развивается неустойчивость. Естественно, для самоорганизации неоднородного вдоль ГР состояния системы требуются достаточно высокие концентрации ассоциатов  $M_0 > T/K_{\text{ins}}\nu|\chi|\Omega_A^2$ , поэтому в экспериментальных условиях могут проявляться оба эффекта. Конечно, притяжение частиц, ответственное за образование фазы, способствует снижению значений пороговых концентраций ассоциатов, выше которых развивается концентрационно-упругое расслоение. В отличие от спиноподобного распада, переводящего систему в состояние равновесия, концентрационно-упругие неустойчивости системы НА у ГР имеют место в неравновесном стационарном состоянии при наличии локального массопереноса и отсутствуют в равновесии. Действительно, пусть изолирующий слой имеет конечную толщину, а уровень Ферми в металле расположен существенно выше уровня энергии электрона, локализованного на ядре ион + окружающая матрица диэлектрика. Тогда все ионы будут нейтрализованы и в равновесном состоянии (в отсутствие внешнего поля)  $\eta = \text{const}$ . Химическим взаимодействием частиц будем пренебрегать. Теперь концентрация  $\bar{M}$  не зависит от координаты  $z$ , а для фурье-преобразования флуктуации  $\delta\bar{M}$  получим

$$\delta\bar{M} = K\Omega_A^2\nu\chi\bar{M}[T + K\Omega_A^2(1 - \nu)\bar{M}]^{-1}ke^{-kz} \times \int_0^{\infty} e^{-kz'}\delta\bar{M}(z')dz'.$$

Для существования решения этого уравнения необходимо  $\chi > 2[(1/\nu) - 1]$ , что приводит к отрицательным значениям модулей упругости. Отметим, что замечание, касающееся устойчивости однородного состояния в равновесии, справедливо, вообще говоря, для контакта упругих изотропных сред. В существенно неизотропном случае вопрос о возможности концентрационно-упругой самоорганизации ассоциатов в равновесии открыт.

В заключение укажем на ряд экспериментальных работ, в которых исследовались нейтрализация и транспорт ионов по изолятору, а также наблюдались проявления неоднородного распределения частиц вдоль ГР полупроводник-диэлектрик. Приведем также оценки концентрации ассоциатов, необходимой для их самоорганизации. Захват электронов из Si на ловушки в SiO<sub>2</sub>, связанные с Na<sup>+</sup> (нейтрализация ионов), известен уже давно [10,11]. У ГР Si-SiO<sub>2</sub> обнаружены стационарная незатухающая циркуляция ассоциатов и ионов при температурах выше 100°C, а также различные переходные

процессы, связанные с ионизацией нейтральных частиц при деполяризации диэлектрика [5,6]. Вычисляя упругие модули через плотности сред и скорости звука в Si и в плавленном кварце [12], получаем значения  $\nu = 0.3835$ ,  $\chi = -0.068$ . В качестве объема  $\Omega_A$  (объем расширения окисла, возникающего из-за внедрения одного иона) примем объем шара с радиусом, равным удвоенной длине связи Si-O, т.е. равным 3.24 Å [13]. Находим  $\Omega_A \approx 1.42 \cdot 10^{-22} \text{ см}^3$ . Таким образом, выражение для  $\alpha$  можно записать в форме

$$\alpha = -32(K_{\text{ins}}/3.36 \cdot 10^{11} \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-3})(-\nu\chi/0.026) \times (\Omega_A/1.42 \cdot 10^{-22} \text{ см}^3)^2 (M_0/10^{22} \text{ см}^{-3})(400 \text{ К}/T).$$

Если учесть, что длина диффузии ассоциатов составляет  $\approx 25 \text{ Å}$  [5], принять для расчета указанные выше значения параметров среды и температуры, то окажется, что необходимое условие  $\alpha < -16$  выполняется при  $M_s > 1.25 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ . В настоящее время есть только косвенные экспериментальные указания о проявлениях концентрационно-упругой самоорганизации частиц у ГР Si-SiO<sub>2</sub>. В работе [14] наблюдали резкое усиление темпа генерации неосновных носителей заряда после поляризации диэлектрика Si-MOП структуры (ионы перемещались от затвора к контакту Si-SiO<sub>2</sub>). В соответствии с моделью [15,16] данный эффект объяснялся образованием ионных ступок, кулоновские поля которых и стимулировали рождение электронно-дырочных пар. При исследованиях электронных свойств границы раздела Si-SiO<sub>2</sub> [17] в относительно слабых ( $< 10^5 \text{ В/см}$ ) полях наблюдалась поляризация макроскопических образований, сосредоточенных в окисле вблизи поверхности Si. Поляризация связывалась с экранированием внешнего поля электронами, локализованными в данных образованиях.

Автор благодарен И.Е. Дикштейну за дискуссии, стимулировавшие постановку этой работы, и А.Г. Ждану за обсуждение результатов.

## Список литературы

- [1] А.Г. Хачатурян. *Теория фазовых превращений и структура твердых растворов* (М.: Наука, 1974).
- [2] J.P. Ipatova, V.G. Malyshkin, V.A. Shchukin. *J. Appl. Phys.*, **74**, 7198 (1993).
- [3] Г.Н. Гайдуков, Б.Я. Лобов. *ФТТ*, **21**, 1701 (1979).
- [4] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, Г.В. Чучева. *ФТП*, **33**, 933 (1999).
- [5] E.I. Goldman, A.G. Zhdan, G.V. Chucheva. *J. Appl. Phys.*, **89**, 130 (2001).
- [6] A.L. Roitburd. *Sol. St. Phys.*, **33**, 317 (1978).
- [7] Е.И. Гольдман. *ФТП*, **34**, 984 (2000).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика* (М., Наука, 1976) ч. 1, с. 315.
- [9] М.В. Федорюк. *Метод перевала* (М., Наука, 1977).
- [10] T. Hino, K. Yamashita. *J. Appl. Phys.*, **50**, 4879 (1979).
- [11] D.J. DiMaria. *J. Appl. Phys.*, **52**, 7251 (1981).

- [12] Под ред. М.П. Шаскольской. *Акустические кристаллы* (М., Наука, 1982).
- [13] А.П. Барабан, В.В. Булавинов, П.П. Коноров. *Электроника слоев SiO<sub>2</sub> на кремнии* (Изд-во ЛГУ, 1988) с. 55.
- [14] А.Г. Ждан, Ю.В. Маркин, А.М. Сумарока. *Микроэлектроника*, **22**, 54 (1993).
- [15] Е.И. Гольдман. *ФТП*, **27**, 269 (1993).
- [16] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, А.М. Сумарока. *Письма ЖЭТФ*, **57** (12), 783 (1993).
- [17] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, А.Н. Пономарев. *ФТП*, **28**, 1947 (1994).

*Редактор Л.В. Беляков*

## **Concentration-elastic instabilities in the distribution of ions and neutral particles in the insulator layer on the semiconductor surface**

*E.I. Goldman*

Institute of Radio Engineering and Electronics,  
Russian Academy of Sciences,  
141120 Fryazino, Russia

**Abstract** In dielectric films, separating the gate and the substrate semiconductor there are mobile impurities of ions and neutral formations. At sufficiently high temperatures and polarizing electric fields the impurities concentrate near the semiconductor–insulator interface, where the electron exchange with the semiconductor takes place. It is demonstrated that the pair interaction between the particles due to the elastic strain field caused by the concentration expansion of an insulator can lead to the instability of a homogenous distribution of the impurities along the interface. The stationary small-scale particle arrangement accompanied by annular flows of impurities arises in the point defect solution.